

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ»
(ФГБОУ ВО «УУНиТ»)

На правах рукописи

Кутлумухамедов Артур Рамилевич

**МЕТОД РАСЧЁТА ВЫБРОСОВ МОНООКСИДА УГЛЕРОДА
С ФОРМАЛИЗОВАННЫМ ВЫДЕЛЕНИЕМ ЗОН,
ЛИМИТИРУЮЩИХ ЕГО ОКИСЛЕНИЕ В КАМЕРАХ СГОРАНИЯ
ГАЗОТУРБИННЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ**

2.5.15. Тепловые, электроракетные двигатели
и энергоустановки летательных аппаратов

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата технических наук

Научный руководитель:

Бакиров Фёдор Гайфуллович

доктор технических наук, профессор

Уфа – 2024

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
ГЛАВА 1 АКТУАЛЬНОСТЬ ПРОБЛЕМЫ СНИЖЕНИЯ ВЫБРОСОВ МОНООКСИДА УГЛЕРОДА ИЗ КАМЕР СГОРАНИЯ ГТД.....	12
1.1 Экологические требования, предъявляемые к камерам сгорания ГТД.....	12
1.2 Некоторые аспекты образования и выгорания монооксида углерода.....	15
1.3 Основные концепции создания малоэмиссионных камер сгорания и сопутствующие трудности снижения выбросов монооксида углерода	25
1.4 Проблема расчетной оценки выбросов монооксида углерода из камер сгорания ГТД.....	29
1.4.1 Расчет по полуэмпирическим зависимостям	29
1.4.2 Вычислительная газовая динамика (CFD моделирование)	31
1.4.3 Реакторный метод	35
1.4.4 Детальные и глобальные механизмы химической кинетики	36
Выводы к первой главе.....	38
ГЛАВА 2 КОМБИНИРОВАННЫЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА ВЫБРОСОВ МОНООКСИДА УГЛЕРОДА ИЗ КАМЕР СГОРАНИЯ ГТД.....	40
2.1 Выбор комбинированного метода (CFD и реакторный метод) в качестве приоритетного	40
2.2 Обзор работ, посвященных оценке выбросов монооксида углерода из камер сгорания ГТД по комбинированному методу	41
2.3 Математическая модель реактора идеального смешения (PSR).....	48
2.4 Математическая модель реактора идеального вытеснения (PFR).....	50
2.5 Расчетное исследование влияния отдельных факторов на уровень выбросов СО из камер сгорания ГТД с помощью комбинированного метода (CFD и реакторный метод)	51
Выводы ко второй главе	59
ГЛАВА 3 МЕТОД РАСЧЕТА ВЫБРОСОВ МОНООКСИДА УГЛЕРОДА С ФОРМАЛИЗОВАННЫМ ВЫДЕЛЕНИЕМ ЗОН, ЛИМИТИРУЮЩИХ ЕГО ОКИСЛЕНИЕ В КАМЕРАХ СГОРАНИЯ ГТД.....	61
3.1 CFD моделирование.....	62
3.1.1 Моделирование турбулентности	62
3.1.2 Моделирование горения.....	66
3.1.3 Моделирование лучистого теплообмена.....	68

3.2 Построение реакторной модели камеры сгорания	73
3.2.1 Расчет равновесного состояния продуктов сгорания.....	73
3.2.2 Выбор расчетных сечений	74
3.2.3 Выявление «бедных» струек топливовоздушной смеси.....	75
3.2.4 Моделирование зоны пламени	78
3.2.5 Моделирование фронтального устройства	79
3.2.6 Моделирование смешения и массообмена между реакторами.....	84
3.3 Краткое описание разработанного метода расчета выбросов монооксида углерода из камер сгорания ГТД.....	87
3.4 Критерии и алгоритмы формализованного построения реакторной модели камеры сгорания.....	92
Выводы к третьей главе.....	96
4 АПРОБАЦИЯ РАЗРАБОТАННОГО МЕТОДА РАСЧЕТА ВЫБРОСОВ МОНООКСИДА УГЛЕРОДА ИЗ КАМЕР СГОРАНИЯ ГТД.....	98
4.1 Программный пакет CANTERA	98
4.1.1 Расчет равновесного состояния.....	98
4.1.2 Моделирование реактора идеального смешения.....	100
4.1.3 Моделирование реактора идеального вытеснения.....	103
4.1.4 Моделирование смешения потоков	105
4.1.5 Реакторная модель камеры сгорания	107
4.2 Расчет выбросов монооксида углерода из камеры сгорания наземной энергетической установки.....	112
4.2.1 Исследуемая камера сгорания	112
4.2.2 Расчет и пример доработки камеры сгорания серийной (исходной) компоновки.....	115
4.2.3 Результаты CFD моделирования конвертированной камеры сгорания .	120
4.2.4 Реакторная модель камеры сгорания. Сравнение результатов расчета с экспериментом	123
Выводы к четвертой главе.....	131
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	133
СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ.....	135
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	139

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность и степень разработанности темы исследования. К авиационным ГТД гражданского назначения и наземным ГТУ предъявляются требования по допустимым концентрациям вредных веществ в продуктах сгорания. Эти требования последовательно ужесточаются.

К вредным веществам относят – оксиды азота NO_x , монооксид углерода CO (систематическое наименование – оксид углерода (II)), несгоревшие углеводороды uCH , частицы сажи и др. Количество вредных веществ в продуктах выхлопа, главным образом, определяется рабочим процессом в камере сгорания. Известно, что механизмы образования вредных веществ отличны между собой. Соответственно различаются мероприятия направленные на устранение тех или иных вредных веществ, а также методы оценки их количества в продуктах сгорания.

Выделяют три основных метода расчетной оценки концентраций вредных веществ: расчет по полуэмпирическим зависимостям и статистическим данным; реакторный метод и вычислительная газовая динамика (CFD). Существуют также комбинированные методы расчета.

Метод расчета выбросов вредных веществ по полуэмпирическим зависимостям и статистическим данным «опирается» на экспериментальную базу и позволяет выполнять относительно быстрые вычисления без применения сложных программных продуктов. Однако применение зависимостей, полученных по эмпирическим данным, ограничено конструкцией и условиями работы камеры сгорания.

CFD – наиболее популярный и развитый метод расчетной оценки вредных выбросов из камер сгорания ГТД т.к. результат моделирования содержит трехмерную картину распределения скоростей и реагентов в рабочей области. Однако сложность математических моделей и недостаточная вычислительная мощность современной техники ограничивают прямое применение детальных (многокомпонентных) механизмов химической кинетики, что сказывается на

точности расчета скоростей реакций. В связи с этим исследователи вынуждены строить модели горения на допущениях, которые «отделяют химию от газодинамики».

В реакторном методе камера сгорания моделируется цепью (сетью) реакторов. Математические модели реакторов относительно просты и позволяют проводить быстрые вычисления с применением детальных механизмов химической кинетики (с точным расчетом скоростей реакций). Однако структура течения в этих моделях чрезмерно упрощена.

В настоящей работе разработан метод расчёта выбросов СО из камер сгорания ГТД в рамках развития концепции «комбинированных методов» расчёта вредных выбросов [31, 24, 22, 45, 46, 54, 70, 74, 79-82, 84-86, 91, 95, 99, 100]. Комбинируются CFD и реакторный метод. При таком подходе реакторная модель камеры сгорания строится на базе результатов трехмерного моделирования. Это позволяет проводить расчеты с детальной химической кинетикой и более точной оценкой структуры течения.

Развитию комбинированных методов и их базовых положений посвящено значительное количество отечественных и зарубежных исследований, приведенных в работах Захарова В.М., Лебедева А.Б., Секундова А.Н., Старика А.М., Кашапова Р.С., Максимова Д.А., Скибы Д.В., Бакирова Ф.Г., Лукачёва С.В., Диденко А.А., Зубрилина И.А., Матвеева С.С., Чечета И.В., Семенихина А.С., Мингазова Б.Г., Цатиашвили В.В., а также Turns S.R., Marchand M.D., Novosselov I.V., Rutar T., Malte P.C., Nicol D.G., Fichet V. и др.

По результатам обзора соответствующей литературы, применительно к задаче оценки уровня выбросов СО по комбинированному методу, отмечено следующее:

- большинство работ посвящено расчету выбросов оксидов азота (NO_x);
- необходимо повышение точности расчетов выбросов СО по комбинированному методу;

- существенное влияние на точность оценки выбросов СО оказывает учет неоднородности состава смеси (неравномерности распределения коэффициента избытка воздуха);

- требуется формализация процесса построения реакторной модели камеры сгорания по структуре течения, полученной из CFD моделирования.

Работа посвящена оценке выбросов СО из камер сгорания ГТД работающих на природном газе (метане). Это топливо широко используется в наземных ГТУ, в том числе конвертированных из авиационных двигателей. В качестве авиационного топлива сжиженный природный газ (СПГ) обладает рядом преимуществ т.к. позволяет снизить количество CO_2 в продуктах сгорания (ввиду меньшего отношения C/H) и обладает большим хладоресурсом (температура ожижения порядка 112 К [26]). Возможность практической реализации применения СПГ в авиации впервые подтверждена лётными испытаниями самолёта Ту-156 с двигателями НК-89 [35, 52].

Таким образом, тема работы актуальна ввиду постоянного ужесточения требований по вредным выбросам и необходимости совершенствования существующих методов расчета количества монооксида углерода в продуктах сгорания ГТД.

Цель работы: повышение эффективности проектирования камер сгорания газотурбинных двигателей, работающих на природном газе, при оценке выбросов монооксида углерода за счёт формализованного выделения зон, лимитирующих его окисление.

Задачи работы:

- 1 Исследовать влияние физико-химических факторов на процессы образования и выгорания монооксида углерода.

- 2 Разработать метод расчёта выбросов СО из камер сгорания ГТД по формализованной реакторной модели с детальной химической кинетикой и схематичным описанием структуры течения, распределения воздуха и неравномерности по коэффициенту избытка воздуха.

3 Разработать критерии формирования реакторной модели камеры сгорания по результатам обработки трёхмерного CFD моделирования.

4 Выполнить апробацию разработанного метода на исходной и конвертированной малоэмиссионной конструкции камеры сгорания с сопоставлением расчётных выбросов СО с результатами лабораторных и натурных измерений при работе на природном газе.

Объект и предмет исследования. Объект исследования – процессы образования и выгорания монооксида углерода в камерах сгорания ГТД. Предмет исследования – методы расчета концентраций монооксида углерода на выходе из камер сгорания ГТД.

Научная новизна

1 Разработан новый метод расчёта выбросов монооксида углерода (СО) из камер сгорания ГТД с применением детальной химической кинетики, отличающийся формализованным построением реакторной модели камеры сгорания по результатам трёхмерного CFD моделирования со схематичным описанием структуры течения, распределения воздуха и неравномерности коэффициента избытка воздуха.

2 Разработан новый критерий формирования реакторной модели камеры сгорания, отличающийся обобщением «бедных» зон, неравномерно распределённых в рабочем объёме, в низкотемпературные «бедные» струйки с низкой скоростью окисления монооксида углерода.

3 Разработан новый критерий моделирования реакторами зоны пламени, отличающийся выделением высокотемпературной зоны с существенным сдвигом равновесия в сторону монооксида углерода.

4 Представлены новые расчётные зависимости влияния на выбросы СО распределения коэффициента избытка воздуха по длине жаровой трубы конвертированной «богато-бедной» малоэмиссионной камеры сгорания, отличающиеся законом подвода воздуха и режимными параметрами, совместно с данными сравнительного анализа результатов расчётов с экспериментом.

Теоретическая значимость работы. Разработанный метод расчёта позволяет исследовать влияние закона распределения воздуха по жаровой трубе, неоднородности состава горючей смеси, характеристик зон камеры сгорания (зона пламени, смещения, ЗОТ) на процессы образования вредных веществ, в частности СО, в камерах сгорания ГТД.

Практическая значимость работы заключается в разработанном расчетном методе, позволяющим прогнозировать выбросы СО из камер сгорания ГТД на этапе оптимизации распределения воздуха по длине, что снижает материальные и временные затраты по доводке камеры сгорания.

Результаты исследования нашли практическое применение:

- в ОКБ «Мотор» ПАО «ОДК-УМПО» в рамках расчётов камеры сгорания наземной энергетической установки ГТЭ-10/953, разработки технического предложения по газотурбинной энергетической установке ГТУ-2У мощностью 2,5 МВт, оценке вредных выбросов при стендовых испытаниях авиационных двигателей, что подтверждается актом внедрения от 08.10.2024;

- в учебном процессе УУНиТ в рамках преподавания дисциплины «Современные проблемы проектирования авиационных двигателей и энергоустановок» специальности 25.05.02 «Проектирование авиационных двигателей» и «Моделирование процессов горения в камерах сгорания ГТД» для направления магистратуры 24.04.05 «Двигатели летательных аппаратов», что подтверждается актом внедрения от 08.10.2024;

- в ООО «НПФ «Теплофизика» в рамках исследования рабочих процессов малоэмиссионных камер сгорания газотурбинных газоперекачивающих агрегатов ГТК-10ИР, ГТК-25ИР, ДГ-90, что подтверждается актом внедрения от 08.10.2024.

Методы исследования

1 Методы трехмерного моделирования процессов турбулентного горения в камерах сгорания ГТД средствами вычислительной газовой динамики (CFD) с применением коммерческого ПК ANSYS CFX v.16.1.

2 Кинетическое моделирование камеры сгорания сетью взаимосвязанных реакторов в программном пакете CANTERA 2.4.0.

3 Применение детального механизма химической кинетики окисления метана GRI-Mech 3.0 (53 компонента, 325 реакций) при расчете реакторных моделей камеры сгорания.

4 Экспериментальное определение выбросов монооксида углерода от камер сгорания ГТД с применением аттестованного оборудования.

Положения, вносимые на защиту

1 Метод расчёта выбросов монооксида углерода (CO) из камер сгорания ГТД с применением детальной химической кинетики, отличающийся формализованным построением реакторной модели камеры сгорания по результатам трёхмерного CFD моделирования со схематичным описанием структуры течения, распределения воздуха и неравномерности коэффициента избытка воздуха.

2 Критерий формирования реакторной модели камеры сгорания, отличающийся обобщением «бедных» зон, неравномерно распределённых в рабочем объёме, в низкотемпературные «бедные» струйки с низкой скоростью окисления монооксида углерода.

3 Критерий моделирования реакторами зоны пламени, отличающийся выделением высокотемпературной зоны с существенным сдвигом равновесия в сторону монооксида углерода.

4 Расчётные зависимости влияния на выбросы CO распределения коэффициента избытка воздуха по длине жаровой трубы конвертированной «богато-бедной» малоэмиссионной камеры сгорания, отличающиеся законом подвода воздуха и режимными параметрами, совместно с данными сравнительного анализа результатов расчётов с экспериментом.

Достоверность полученных результатов подтверждается:

- применением сертифицированного коммерческого программного продукта ANSYS CFX v.16.1 (вычислительная газовая динамика) и программного пакета CANTERA 2.4.0 (термохимия), верифицированных разработчиками и апробированными исследователями на типовых задачах, характерных для камер сгорания ГТД;

- применением отработанного и широко себя зарекомендовавшего механизма химической кинетики GRI-Mech 3.0 [71], разработанного и оптимизированного для расчетов окисления метана (природного газа);
- применением метрологически аттестованного и поверенного измерительного оборудования;
- высоким уровнем соответствия расчётной и экспериментальной зависимостей выбросов монооксида углерода от режима работы камеры сгорания ($[\text{CO}] = f(\alpha)$).

Апробация результатов исследования. Основные результаты работ прорабатывались на конференциях:

- всероссийской научно-технической конференции «Авиадвигатели XXI века» (Москва, ЦИАМ, 2015);
- всероссийской научно-технической конференции «Научно-технические проблемы современного двигателестроения» (Уфа, УГАТУ, 2016 г.);
- 10-ой Всероссийской зимней школе-семинаре аспирантов и молодых ученых «Актуальные проблемы науки и техники» (Уфа, УГАТУ, 2017 г.);
- международной научно-технической конференции «Проблемы и перспективы развития двигателестроения» (Самара, СГАУ, 2018 г.);
- IX Всероссийской научно-технической конференции молодых специалистов (Уфа, ПАО «ОДК-УМПО», 2018 г.);
- 12-ой Всероссийской зимней школе-семинаре аспирантов и молодых ученых «Актуальные проблемы науки и техники» (Уфа, УГАТУ, 2019 г.);
- 13-ой Всероссийской зимней школе-семинаре аспирантов и молодых ученых «Актуальные проблемы науки и техники» (Уфа, УГАТУ, 2020 г.);
- международной научно-технической конференции «Проблемы и перспективы развития двигателестроения» (Самара, СГАУ, 2021 г.).

Соответствие паспорту специальности. Диссертационная работа соответствует паспорту научной специальности 2.5.15. Тепловые, электроракетные двигатели и энергоустановки летательных аппаратов по следующим пунктам: п. 4 - Рабочие процессы в электроракетных двигателях, энергетических установках для

преобразования энергии и направленного сброса энергии и их подсистемах, а также в сходных по рабочему процессу устройствах: в генераторах и ускорителях плазмы заряженных частиц, макрочастиц; в энергоизлучающих установках; п. 6 - Методы конструирования тепловых и электроракетных двигателей летательных аппаратов, их узлов и систем, включая методы автоматизированного проектирования двигателей с помощью ЭВМ; п. 13 - Математическое моделирование рабочих процессов, характеристик, динамических процессов, рабочих состояний двигателей и энергетических установок, стадий и этапов их жизненного цикла (создания, производства, эксплуатации и утилизации); п. 16 - Методы расчётов воздействия тепловых и электроракетных двигателей на окружающую среду и анализ путей его уменьшения; п. 18 - Процессы создания и доводки двигателей летательных аппаратов. Способы улучшения характеристик и основных данных двигателей, находящихся в серийном производстве и эксплуатации; п. 23 - Разработка методов расчёта термогазодинамических и теплофизических процессов в двигателях и энергосиловых установках летательных аппаратов, их элементах.

Публикации. По теме исследований опубликовано 11 статей, в том числе три статьи опубликованы в изданиях, включенных в список ВАК РФ, и одна статья опубликована в издании базы данных SCOPUS.

Структура и объем работ. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы на 100 наименований. Текст содержит 150 страниц, 61 иллюстрацию и 16 таблиц.

Автор выражает благодарность научному руководителю д.т.н., профессору Бакирову Ф.Г. и к.т.н. Скибе Д.В. за высококвалифицированные научные консультации и помощь в работе.

ГЛАВА 1 АКТУАЛЬНОСТЬ ПРОБЛЕМЫ СНИЖЕНИЯ ВЫБРОСОВ МОНООКСИДА УГЛЕРОДА ИЗ КАМЕР СГОРАНИЯ ГТД

1.1 Экологические требования, предъявляемые к камерам сгорания ГТД

Содержание вредных веществ на выходе из ГТД ограничено жесткими нормами (таблица 1.1). К вредным веществам относят: оксиды азота (NO_x), монооксид углерода (CO), оксиды серы (SO_x), сажу и др.

Таблица 1.1 – Нормы вредных выбросов ГТД (Россия)

АВИАЦИОННЫЕ ДВИГАТЕЛИ ГРАЖДАНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ (АД)	ГАЗОПЕРЕКАЧИВАЮЩИЕ АГРЕГАТЫ С ГАЗОТУРБИННЫМ ПРИВОДОМ (ГПА)	ГАЗОТУРБИННЫЕ УСТАНОВКИ ДЛЯ ПРИВОДА ТУРБОГЕНЕРАТОРОВ (ГТЭУ)
ГОСТ 17.2.2.04 (ИКАО [28])	ГОСТ 28775	ГОСТ 29328
$[\text{NO}_x] = f \left(\frac{\frac{\text{тяга}}{\pi_k}}{\frac{\text{дата изготовления}}{V_{\text{ПОЛЕТА}}}} \right)$ $[\text{CO}] \leq 118 \text{ г/кН}$ - дозвуковые полеты	$[\text{NO}_x] \leq 150 \text{ мг/нм}^3$ - для ГПА без регенерации теплоты; $[\text{NO}_x] \leq 200 \text{ мг/нм}^3$ - для ГПА с регенерацией теплоты; $[\text{CO}] \leq 300 \text{ мг/нм}^3$.	для ГТЭУ эксплуатируемых с 1995 г: $[\text{NO}_x] \leq 50 \text{ мг/нм}^3$ - газообразное топливо; $[\text{NO}_x] \leq 100 \text{ мг/нм}^3$ - жидкое топливо; Нет требований по $[\text{CO}]$.

Авиационные и наземные ГТД должны удовлетворять требования соответствующих государственных стандартов. В тоже время заказчик может предъявлять более строгие нормы по допустимым концентрациям вредных веществ. Например, ПАО «Газпром» утвердил Научно-техническую политику, согласно которой концентрации NO_x не должны превышать $25 \dots 30 \text{ мг/нм}^3$, концентрации CO не должны превышать 100 мг/нм^3 [41].

Нормы выбросов NO_x Агентства по Охране Окружающей Среды США приведены в таблице 1.2 [76]. Применительно к CO , ограничение составляет $10 \text{--} 40 \text{ млн}^{-1}$ ($12 \text{--} 50 \text{ мг/нм}^3$) [76].

Таблица 1.2 – Нормы выбросов NO_x согласно требованиям Агенства по Охране Окружающей Среды США

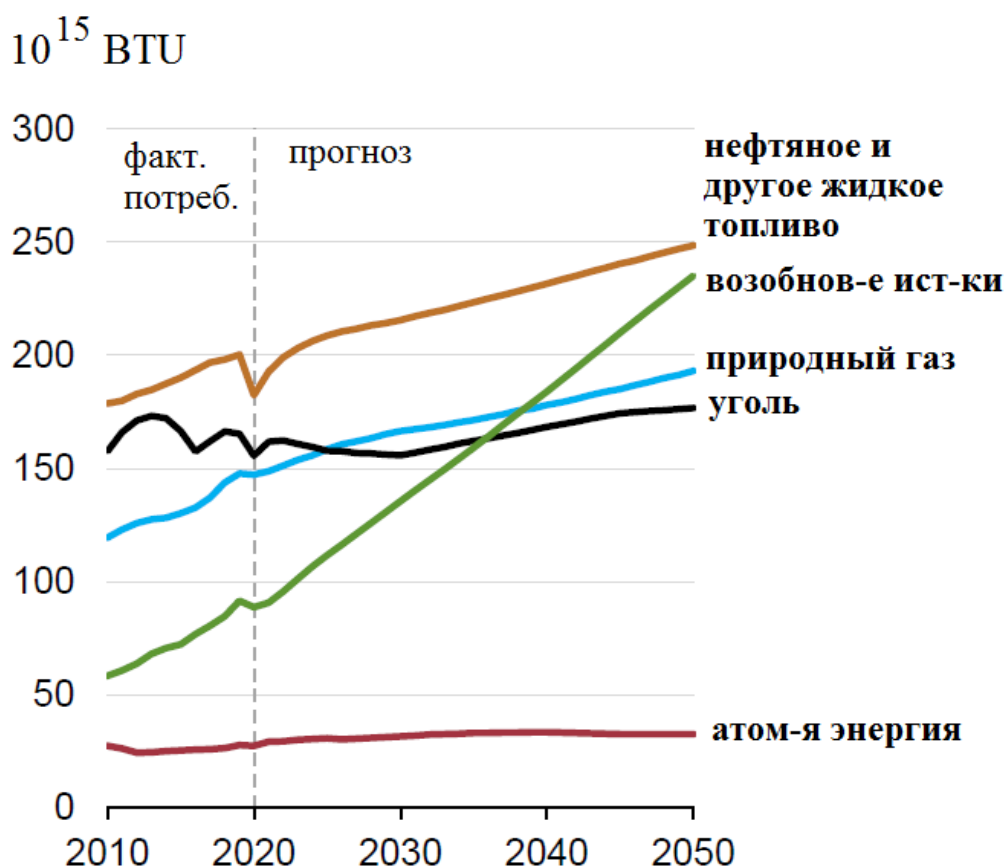
Тип ГТД	Мощность	Норма по NO _x , млн ⁻¹
Новые газотурбинные двигатели для энергетических установок. Топливо: природный газ.	до 3 МВт	42
	3-110 МВт	25
	более 110 МВт	15
Новые газотурбинные двигатели для механических приводов. Топливо: природный газ.	не более 3,5 МВт	100

Нормы содержания вредных веществ в европейских странах приведены в таблице 1.3 [78].

Таблица 1.3 – Нормы эмиссии вредных веществ в европейских странах (ГТУ)

Страна	Мощность	NO _x , мг/нм ³	CO, мг/нм ³
Австрия	< 50 МВт(т)	150	100
	> 50 МВт(т)	150	100
Франция	2-20 МВт(т)	150	100
	20-100 МВт(т)	100	100
Германия	< 100 МВт(э)	150	100
	>100 МВт(э)	100	100
Нидерланды	15-50 МВт(т)	80	60
	>50 МВт(т)	60	50
Великобритания	< 50 МВт(т)	105	100
	> 50 МВт(т)	60	100
Примечание – (т) – тепловая мощность, (э) – электрическая мощность			

Имеется постоянная тенденция к ужесточению норм по эмиссии вредных веществ [6]. Это вызвано естественной необходимостью снижения количества вредных выбросов при росте потребления энергии и, соответственно, углеводородного топлива (рисунок 1.1).



International Energy Outlook 2021 (IEO 2021)

Рисунок 1.1 – Мировое потребление энергии
(BTU $\approx$ 252 кал)

Концентрация вредных веществ в продуктах выхлопа определяет количество вредных выбросов за время эксплуатации. Зависимость годовых выбросов вредных веществ ГТД от их концентрации в продуктах сгорания приведена на графике рисунка 1.2 (принято, что за год ГТД отработало 8000 ч). График построен на базе данных каталога удельных выбросов вредных веществ газотурбинных газоперекачивающих агрегатов (СТО ГАЗПРОМ 2-3.5-039-2005).

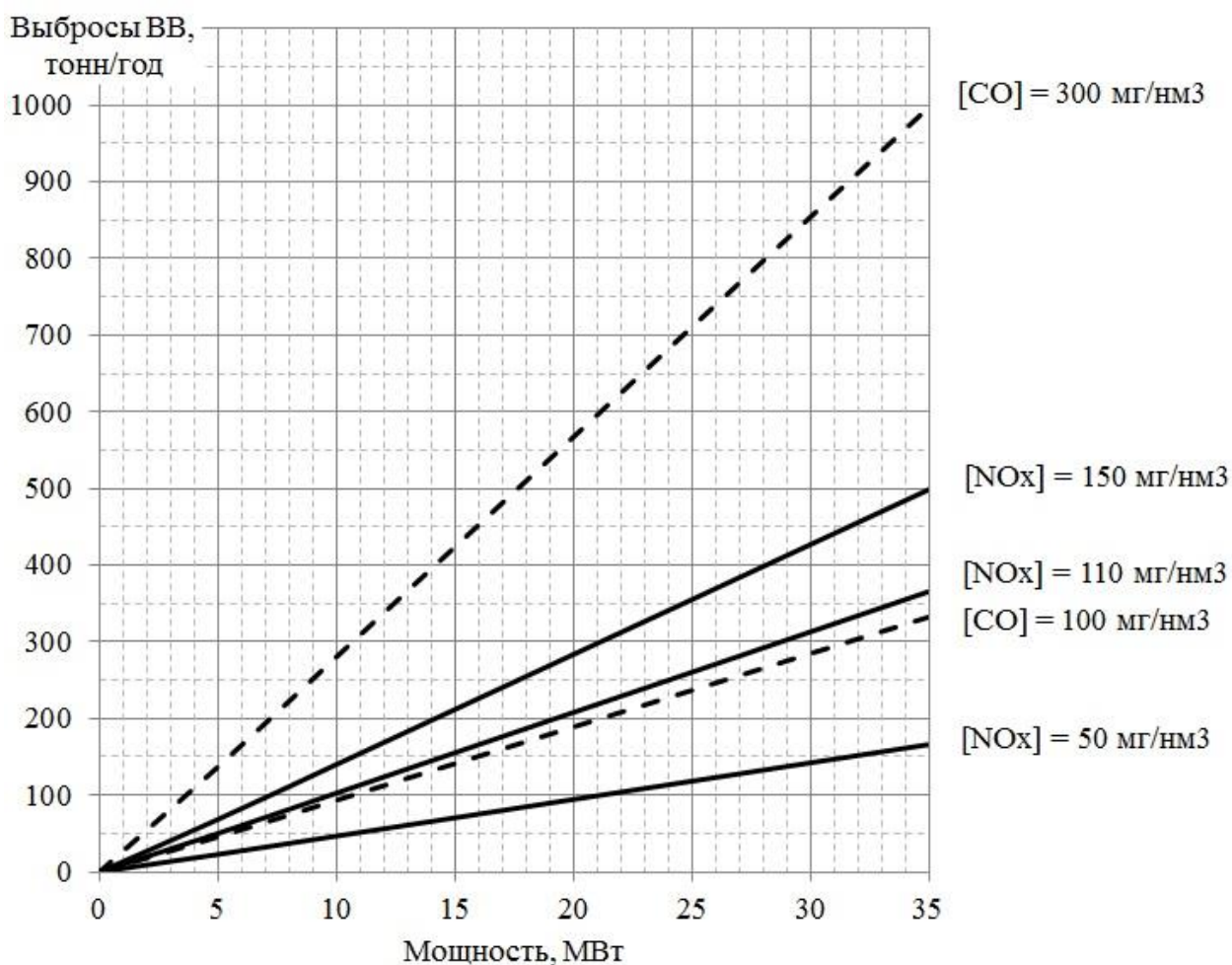


Рисунок 1.2 – Годовые выбросы вредных веществ от ГТД различной мощности

Из рисунка 1.2 видно, например, что для установки мощностью 10 МВт снижение концентраций CO с 300 мг/м³ до 100 мг/м³ уменьшает годовой выброс монооксида углерода на 190 т.

Таким образом, ввиду постоянного роста потребления топлива и ужесточения экологических норм, снижение концентрации вредных веществ в продуктах выхлопа ГТД является актуальной задачей.

1.2 Некоторые аспекты образования и выгорания монооксида углерода

Образование монооксида углерода

Расчетные равновесные значения количества CO и адиабатической температуры продуктов сгорания метано- и керосиновоздушной смеси в

зависимости от состава, давления и начальной температуры приведены на рисунках 1.3, 1.4.

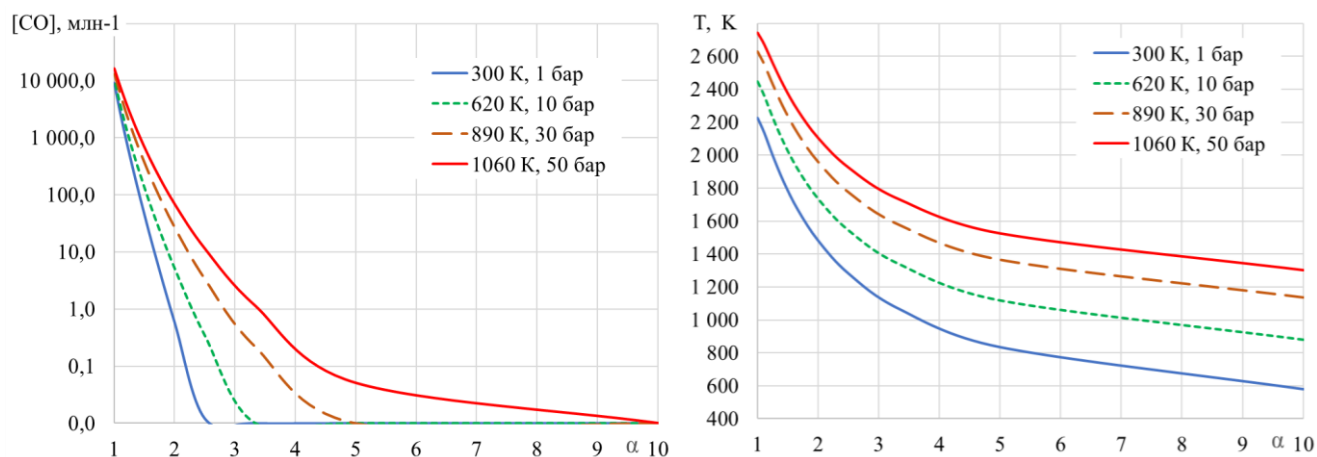


Рисунок 1.3 – Равновесные значения количества СО и адиабатической температуры продуктов сгорания в зависимости от состава, давления и начальной температуры метановоздушной смеси

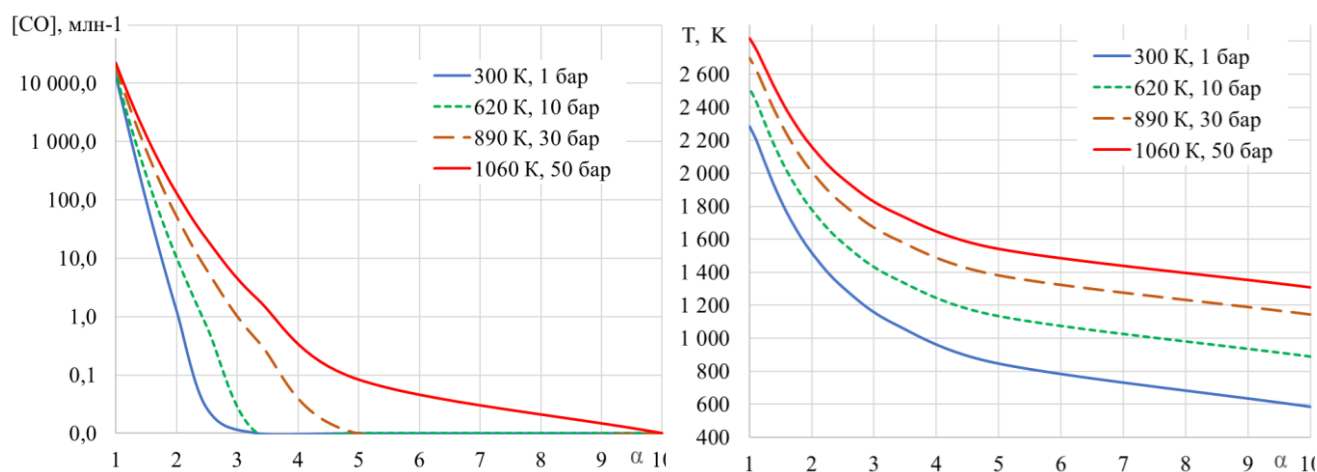


Рисунок 1.4 – Равновесные значения количества СО и адиабатической температуры продуктов сгорания в зависимости от состава, давления и начальной температуры керосиновоздушной смеси

Для метана расчеты выполнены с применением детального механизма химической кинетики GRI-Mech 3.0, для керосина – с применением механизма Dagaut [65] (керосин задавался в виде компонента $\text{NC}_{10}\text{H}_{22}$).

Отметим высокое содержание СО в продуктах сгорания горючих смесей близких к стехиометрическому составу $\alpha \approx 1,0$. Это объясняется смещением равновесия в сторону СО при высокой температуре (термической диссоциацией продуктов сгорания).

В таблице 1.4 приведены данные по степени диссоциации продуктов сгорания углеводородных топлив в зависимости от температуры и давления [55]. Видно, что в диапазоне давлений 0,5-10 МПа диссоциация проявляется при $\sim T \geq 1900$ К.

Таблица 1.4 – Связь между давлением, температурой и степенью диссоциации

Диапазоны давлений, МПа	Отсутствие диссоциации	Слабая диссоциация	Сильная диссоциация
	Диапазоны температур, К		
0,01-0,5	< 1600	1600-2400	> 2400
0,5-2,5	< 1800	1800-2600	> 2600
2,5-10,0	< 2000	2000-2800	> 2800
10,0-50,0	< 2200	2200-3000	> 3000

В работах [3, 4] также отмечается существенное влияние термической диссоциации в основных камерах сгорания при $T_{\text{г}}^* \geq 1900$ К (снижение температуры достигает 20-50 К).

Соответственно, при оценке выбросов СО необходимо учитывать эффекты термической диссоциации в зонах с температурой более 1900 К.

Отдельно отметим, что при $\alpha > 2$ равновесные значения СО не превышают ~ 100 млн⁻¹, в том числе и при высоком давлении и температуре исходной смеси.

Таким образом, при α более ~ 2 имеется потенциальная возможность обеспечения низких уровней выброса СО. Однако, в камерах сгорания ГТД содержание монооксида углерода в продуктах сгорания всегда выше их равновесных значений.

А. Лефевр [26] выделяет следующие причины повышенного уровня СО:

- «низкая скорость горения в первичной зоне вследствие недостатка топлива и (или) нехватки времени пребывания;

- недостаточное перемешивание топлива и воздуха, в результате чего образуются зоны, в которых смесь слишком бедна, чтобы в них поддерживалось горение, а также зоны с излишне богатой смесью, горение в которых приводит к высоким местным концентрациям CO;

- «замораживание» продуктов горения, вовлекаемых в слои воздуха, охлаждающие стенки жаровой трубы (кольцевые камеры сгорания, у которых отношение поверхности жаровой трубы к объему меньше, выбрасывают, вообще говоря, меньше CO, чем трубчатые камеры)».

Ю. Варнатц [5] отметил следующие причины образования CO:

- «тушение (или рассеяние) пламени за счет деформации и растяжения фронта пламени;

- тушение пламени на стенках и в зазорах».

Таким образом, при $\alpha_{КС} > 2,0$ (что соответствует основным рабочим режимам) в камерах сгорания ГТД, повышенный уровень CO обусловлен неполным сгоранием топлива и мероприятия по уменьшению выбросов монооксида углерода должны быть направлены на повышение полноты сгорания топлива [26].

Влияние различных факторов на уровень монооксида углерода на выходе из камер сгорания ГТД

Экспериментальная зависимость выбросов CO от *коэффициента избытка воздуха* α камеры сгорания приведена на рисунке 1.5. Как чрезмерно «богатые», так и чрезмерно «бедные» ТВС приводят к высоким концентрациям монооксида углерода в продуктах выхлопа.

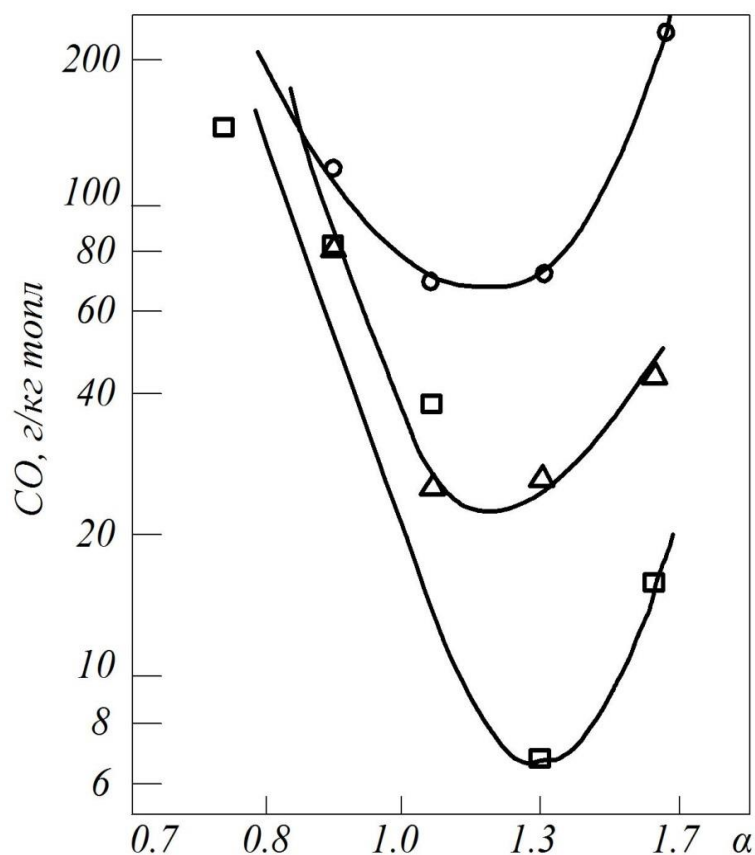


Рисунок 1.5 – Зависимость выбросов CO от состава смеси [26]

($T_{вх} = 573 \text{ K}$, ○ - 0,76 МПа, △ - 1,01 МПа, □ - 1,27 МПа, топливо – DF 2)

Чем выше температура воздуха перед камерой, тем выше температура продуктов сгорания. Рост температуры приводит к ускорению химических реакций, что положительно сказывается на выгорании монооксида углерода (при α более ~ 2).

На рисунке 1.6 приведена экспериментальная зависимость выбросов CO ГТУ НК-38СТ от температуры газов перед свободной турбиной для двух значений температуры окружающей среды: $t_{н} = -3 \text{ }^{\circ}\text{C}$ и $t_{н} = +13 \text{ }^{\circ}\text{C}$. Видно, что с понижением температуры окружающей среды, а значит и температуры перед камерой сгорания, выбросы монооксида углерода растут.

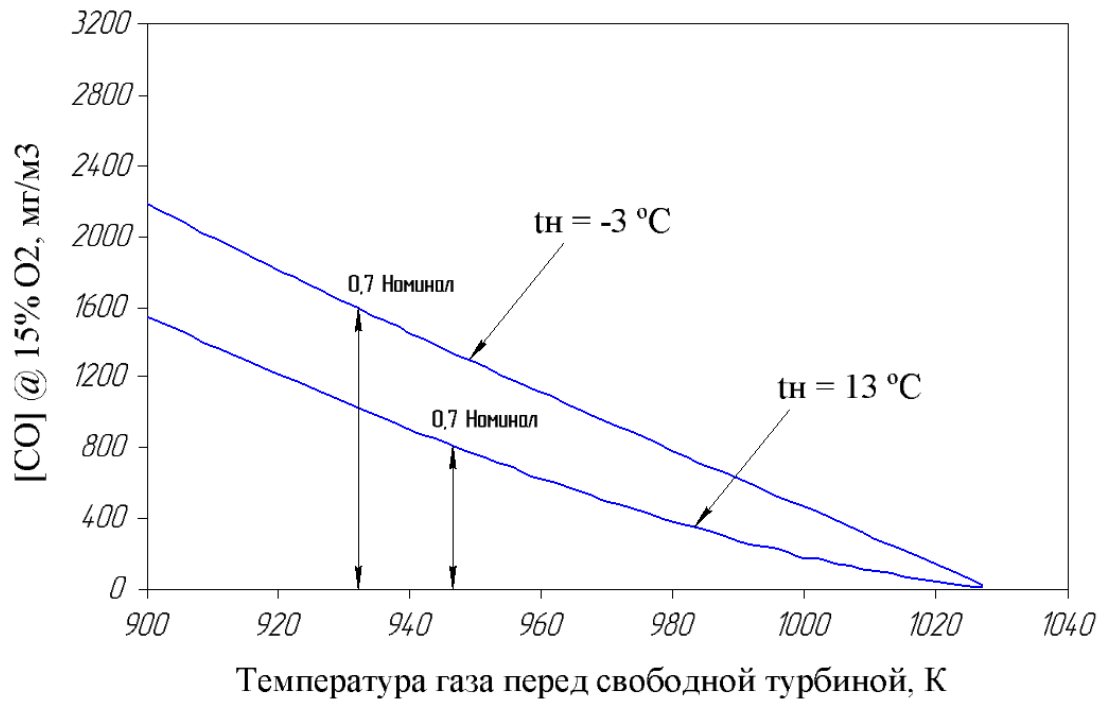


Рисунок 1.6 – Экспериментальная зависимость выбросов CO от температуры газа перед свободной турбиной [42]

Время пребывания τ ТВС в камере сгорания ГТД во многом определяет полноту сгорания топлива, поэтому существенно влияет на выбросы монооксида углерода. Чем больше τ , тем большее количество CO успевает окислиться до CO_2 (рисунок 1.7).

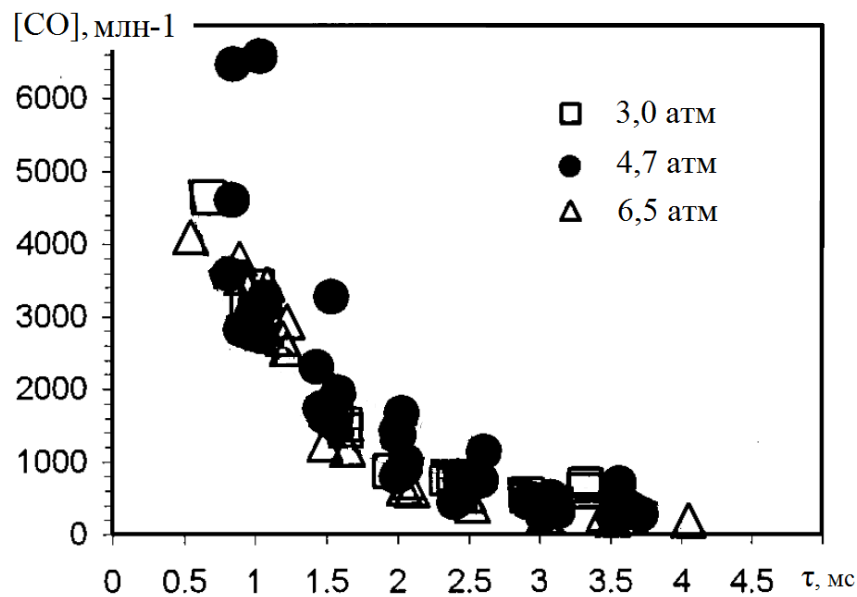


Рисунок 1.7 – Экспериментальная зависимость выбросов монооксида углерода от времени пребывания ТВС в гомогенном реакторе [92]

При некачественной *подготовке ТВС* могут образоваться чрезмерно «богатые», либо «бедные» зоны, которые, ввиду указанных выше причин, будут являться источниками монооксида углерода.

Теплоотвод в холодную пристеночную область от пламени и продуктов неполного сгорания приводит к «замораживанию» реакций окисления и к повышению уровня монооксида углерода. В особенности это проявляется при заградительном охлаждении стенки пеленой холодного воздуха [37, 26, 89].

С ростом *давления* уменьшается расстояние между молекулами реагентов. Это приводит к росту скорости химических реакций, что положительно сказывается на выгорании СО [76].

Кинетика окисления углеводородов и монооксида углерода

Количество вредных выбросов в продуктах сгорания во многом определяется скоростью реакций окисления углеводородных топлив.

Из химической кинетики известно, что горение углеводородных топлив можно условно разделить на две стадии: окисление углеводородов до СО и догорание образовавшегося СО до СО₂ [96].

Окисление углеводородных топлив происходит по сложному цепному механизму с большим количеством промежуточных реакций. Однако, из всего множества реакций, наибольшим влиянием на развитие процессов горения обладает реакция:



Это реакция разветвления цепи, после которой увеличивается количество радикалов. Образовавшиеся радикалы затем активно реагируют с другими компонентами. (До реакции – один радикал, после – два радикала, при этом Н. Pitsch рекомендует учитывать радикал О «за двоих» [88])

Основным «конкурентом» реакции (1.1) является реакция:



где М – активная частица.

Образовавшийся радикал HO₂ затем вступает в реакции «гибели» цепи (с уменьшением количества радикалов).

Таким образом, баланс радикалов в системе, а следовательно, и направление развития химических процессов (горение – погасание), главным образом определяется соотношением реакций (1.1) и (1.2).

Применительно к окислению монооксида углерода можно отметить следующее.

1 Сухие (без водяных паров) $\text{CO} + \text{O}_2$ реагируют крайне медленно. Присутствие воды/водорода значительно увеличивает скорость окисления монооксида углерода [36].

2 Основная реакция окисления монооксида углерода [96]:



3 Реакция окисления CO вносит значительный вклад в общее выделение теплоты при горении.

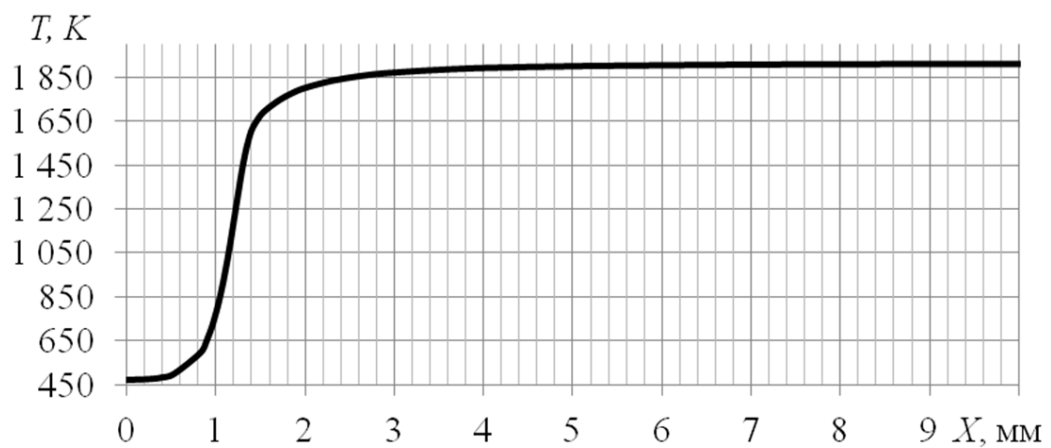
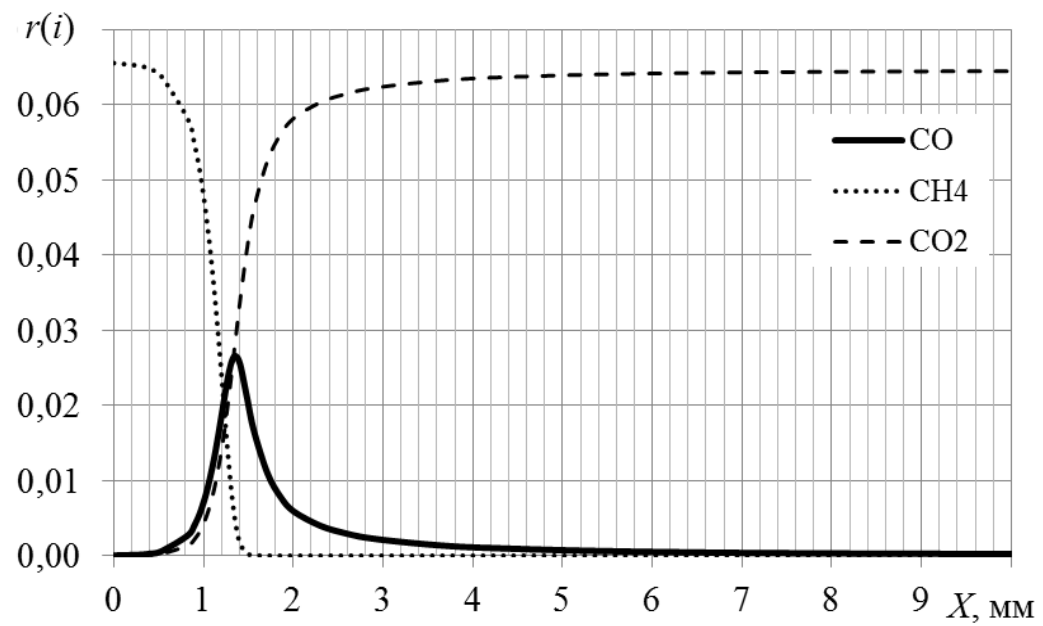
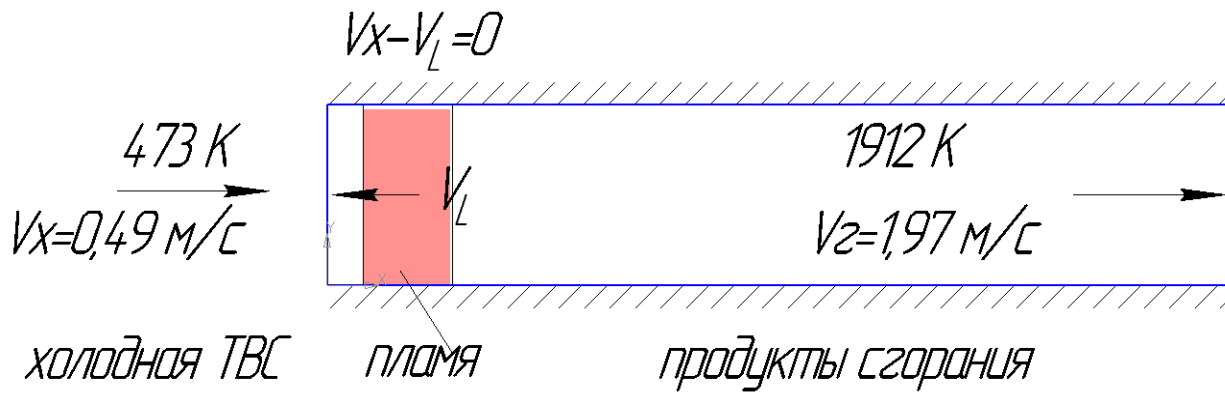
Выгорание монооксида углерода в ламинарном пламени

Рассмотрим результаты расчета распространения одномерного плоского ламинарного пламени в заранее подготовленной ТВС.

ТВС движется на встречу ламинарному фронту пламени со скоростью $V_X = V_L$, так, что фронт пламени неподвижен. Распределение основных параметров в такой системе приведено на рисунке 1.8.

Отметим следующие особенности с позиции исследования образования/выгорания монооксида углерода:

- концентрация CO максимальна на той же координате, где $[\text{CH}_4] \rightarrow 0$ (т.е. сначала полностью расходуется метан, лишь затем начинается окисление монооксида углерода);
- концентрация CO_2 растет по мере выгорания CO ;
- характерный временной масштаб окисления CO больше масштаба окисления углеводородов (в данном случае метана);



$p = 0,1 \text{ МПа}$, $T_{\text{исх}} = 473 \text{ К}$, $\alpha = 1,5$, метан-воздух,

механизм химической кинетики – GRI-Mech 3.0

Рисунок 1.8 – Плоский ламинарный фронт пламени

- реакция окисления $\text{CO} \rightarrow \text{CO}_2$ вносит значительную долю в общем теплоподводе (на участке выгорания CO температура возрастает с 1620 до 1912 К);
- за пламенем температура увеличилась в 4 раза ($T_{\Gamma}/T_{\text{х}} = 4$), скорость потока также увеличилась в 4 раза ($V_{\Gamma}/V_{\text{х}} = 4$);
- для CO характерны два временных масштаба: быстрое образование в пламени и медленное выгорание в постпламенной зоне;
- толщина фронта пламени (участка с наибольшими скоростями окисления топлива) составляет порядка 1 мм.

Важно отметить, что при расчете скорости ламинарного фронта пламени важна корректная оценка как скоростей химических реакций (R), так и процессов смешения реагентов (D) [1, 40]:

$$v_L \propto \sqrt{D \cdot R}. \quad (1.4)$$

Время воспламенения горючей смеси

Расчетная зависимость времени самовоспламенения τ метановоздушной смеси от исходной температуры приведена на рисунке 1.9.

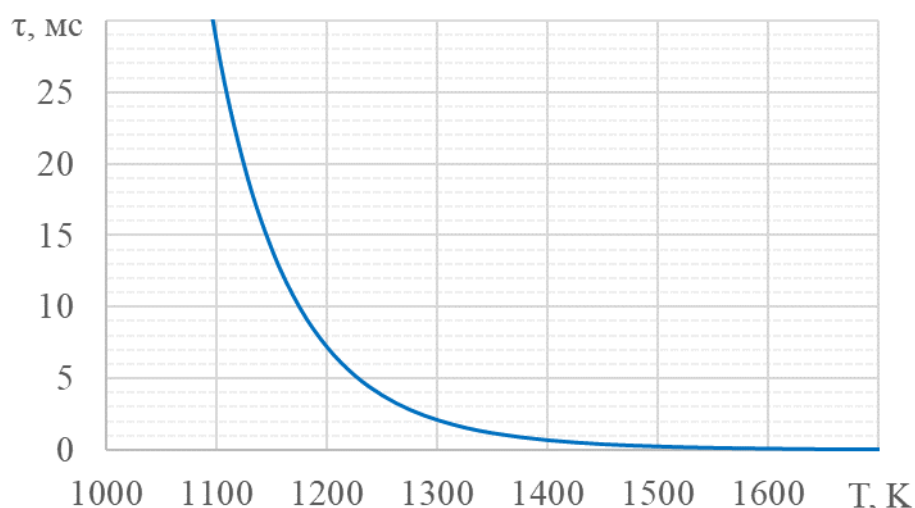


Рисунок 1.9 – Время воспламенения метановоздушной смеси

($p = 0,5$ МПа, $\alpha = 2,0$, GRI-Mech 3.0)

Отмечено, что дефлаграционное горение требует менее 1 мс для завершения на 80 % [26]. Соответственно, при времени задержки воспламенения $\tau > 1$ мс

локальное время пребывания горючей смеси может оказаться недостаточным для завершения процессов горения. Из рисунка видно, что этому соответствует температура $T < 1400$ К. Таким образом, значение температуры $T \approx 1400$ К можно принять в качестве границы, соответствующей началу повышенного содержания СО в продуктах сгорания.

1.3 Основные концепции создания малоэмиссионных камер сгорания и сопутствующие трудности снижения выбросов монооксида углерода

Для начала рассмотрим особенности камер сгорания «традиционного» типа.

В камерах сгорания *«традиционного» типа* топливо и воздух подаются отдельно в зону горения. Локальный состав ТВС варьируется от «чистого» воздуха ($\alpha = \infty$) до «чистого» топлива ($\alpha = 0$). Фронт пламени располагается в зоне стехиометрического состава смеси ($\alpha = 1$). Наличие высокотемпературных стехиометрических зон является основной причиной высокого уровня оксидов азота в камерах сгорания данного типа.

В тоже время высокая температура в зоне горения и турбулентное смешение реагентов позволяет обеспечить устойчивый розжиг и работу камеры в широком диапазоне входных параметров, высокую полноту сгорания топлива и низкий уровень выбросов СО.

Введение воды/пара/выхлопных газов в зону горения можно отметить как первую концепцию снижения выбросов оксидов азота от камер сгорания ГТД. Идея заключается в снижении температуры в зоне горения за счет подвода инертного разбавителя. Это уменьшает образование NO_x по термическому механизму Я.Б. Зельдовича.

Недостатки концепции:

- усложнение системы регулирования;
- необходимость подготовки большого количества разбавителя (так отношение расхода воды к расходу топлива составляет порядка единицы, для пара – 2-3 [72]);

- повышение уровня выбросов СО ввиду снижения скоростей окисления топлива.

Предварительная подготовка горючей смеси – наиболее распространённая концепция создания малоэмиссионных камер сгорания. До подачи в зону горения топливо смешивают с воздухом в специальных премиксерах, образуя «бедную» ТВС определенного состава. Состав смеси подбирается так, чтобы температура в зоне горения не превышала ~ 1800 К. Это позволяет существенно снизить выбросы NOx по термическому механизму.

Недостатки и проблемы концепции:

- пульсации давления;
- произвольное самовоспламенение и проскок пламени вверх по потоку, что приводит к обгоранию элементов премиксера;
- сужение диапазона устойчивой работы камеры сгорания;
- проблема обеспечения устойчивого розжига камеры сгорания (во фронт подается большее количество воздуха, что увеличивает скорость течения и затрудняет воспламенение);
- недостаточно высокая температура в зоне горения приводит к необходимости увеличения объёма КС для полного выгорания монооксида углерода (например, объем малоэмиссионной камеры сгорания General Electric LM6000+ в два раза больше исходного варианта [39]).

Моделирование процессов горения в камерах с предварительным смешением топлива усложняется необходимостью оценки скорости распространения пламени в турбулентном потоке [5, 58, 59].

В «богато-бедных» камерах сгорания (RQL – Rich-Quench-Lean) – организуется поэтапное горение топлива. На первом этапе горит «богатая» ТВС. Ввиду отсутствия свободного кислорода и относительно низких температур в зоне горения оксиды азота практически не образуются. Второй этап – быстрое смешение с воздухом до образования «бедной» смеси. Именно второй этап во многом определяет эффективность работы RQL-камеры сгорания. Горючая смесь неизбежно «проходит» зоны со стехиометрическим составом, соответственно от

быстроты и качества процессов смешения зависит количество образовавшегося NOx. Третий этап – горение «бедной» смеси. Здесь догорают остатки топлива и монооксида углерода.

К преимуществам концепции относят широкий диапазон устойчивого розжига и работы камеры сгорания. Также при конвертировании камер сгорания авиационных ГТД в наземные не требуются увеличения объема зоны горения и количества подводов топлива [76].

Основной недостаток концепции - сложность осуществления равномерного и быстрого смешения «богатой» смеси с воздухом для обеспечения заданных экологических характеристик. Оптимизация процессов смешения требует большого количества доводочных работ.

В камере сгорания изменяемой геометрии предусмотрены элементы, регулирующие распределение воздуха в жаровой трубе. Например, уменьшение площади проходного сечения фронтального устройства на режимах малой тяги позволяет обеспечить оптимальный состав смеси в зоне горения, повысить устойчивость и снизить токсичность работы камеры сгорания. Основным недостатком концепции – усложнение конструкции и системы регулирования, что неблагоприятно сказывается на надежности камеры сгорания.

Концепция *камеры сгорания с зонной подачей топлива* подразумевает разделение объема жаровой трубы на участки (зоны), что позволяет оптимизировать рабочий процесс на режимах малой и полной мощности. Как правило, камеры сгорания состоят из двух зон горения: дежурной и основной. Дежурная зона позволяет получить высокую полноту сгорания топлива на режимах малого газа. Основная зона проектируется для условий работы на нагруженных режимах.

Недостатки концепции: усложнение конструкции, увеличение поверхности жаровой трубы, а также увеличение длины камеры сгорания (при осевом расположении зон) и проблемы с эпюрой температур на выходе (при радиальном расположении зон горения) [76].

В каталитической камере сгорания организовано горение ультра «бедной» ТВС, что снижает температуру горения, а следовательно, и выбросы NOx. Устойчивого горения добиваются с помощью катализаторов – веществ, которые ускоряют реакции окисления, но не участвующие в них.

Классическая схема каталитической камеры сгорания состоит из трех участков. В первом осуществляется подготовка «бедной» горючей смеси. Далее смесь поступает в каталитическую решетку, где происходит воспламенение и низкотемпературное горение. После расположена зона догорания топлива и СО.

Каталитические камеры сгорания позволяют добиться низких выбросов оксидов азота – менее 5 млн⁻¹. Однако, для достижения этого требуется решить ряд проблем: обеспечить качественное смешение топлива (локальные «богатые» зоны могут привести к прогарам каталитической решетки, локальные «бедные» зоны – к проблеме выбросов СО); обеспечить устойчивость каталитического покрытия к «выветриванию» и растрескиванию в течении заданного ресурса; обеспечить устойчивый розжиг при низкой температуре воздуха перед камерой; обеспечить полное выгорание монооксида углерода за каталитической решеткой.

Применение *синтетического топливного газа («синтез-газа»)* также можно рассматривать как концепцию создания малоэмиссионных камер сгорания. Синтез-газ получают обработкой углеводородных топлив (угля, кокса, природного газа и др.). Основные компоненты синтез-газа: водород (H₂), монооксид углерода (СО) и инертный разбавитель - как правило, азот N₂, либо пары воды. Количественное соотношение компонентов, а следовательно, и свойства топлива варьируется в зависимости от исходного сырья и технологии его обработки.

Наличие легкого и «активного» водорода позволяет организовать устойчивое низкотемпературное горение, чем и обусловлено снижение выбросов NOx. Кроме того, в работе [77] показано, что синтез-газ меньше склонен к пульсационному горению в сравнении с природным газом.

При создании малоэмиссионных камер сгорания, работающих на синтез-газе, разработчики сталкиваются со следующими особенностями и проблемами:

- повышенный расход топлива (удельная теплотворная способность синтез-газа в 9-11 раз меньше по сравнению с природным газом [50]);
- повышенная склонность к проскоку пламени (ввиду наличия водорода) заставляет разработчиков локально повышать скорость потока, а следовательно, и гидравлические потери;
- повышенное содержание паров воды в продуктах сгорания интенсифицирует теплообмен от газа к элементам камеры и усложняет их охлаждение;
- сложность обеспечения низких выбросов CO ввиду низкой температуры в зоне горения и повышенных тепловых потерь к стенкам камеры.

Таким образом, имеется немало концепций создания малоэмиссионных камер сгорания. Однако, всем им свойственно основное противоречие: низкая температура в зоне горения снижает выбросы оксидов азота, но увеличивает выбросы продуктов неполного сгорания и наоборот – высокая температура в зоне горения повышает уровень NOx, но снижает CO и uCH.

1.4 Проблема расчетной оценки выбросов монооксида углерода из камер сгорания ГТД

1.4.1 Расчет по полуэмпирическим зависимостям

Ограничение вредных выбросов инициировало разработку специальных формул (зависимостей), позволяющих оценить выбросы NOx и CO на этапе проектирования камер сгорания. Такие зависимости построены на базе теории рабочих процессов и экспериментальных данных и, поэтому, являются полуэмпирическими [51, 7, 26, 27].

Полуэмпирические зависимости оценки выбросов монооксида углерода разрабатывались как зарубежными, так и отечественными исследователями. Рассмотрим лишь некоторые из них.

В работе [51] предложена следующая зависимость расчета выбросов CO:

$$\begin{aligned}
EI_{CO} = & B(P_K^*)^{-1,8} \frac{G}{V_{жс}} (T_z^*)^{-1} \cdot e^{\left(-\frac{T_K^*}{288}\right)} \cdot e^{\left(C_1 \left(\frac{N_\phi}{F_{жс}}\right)^2 + C_2 \frac{N_\phi}{F_{жс}}\right)} \cdot \left[1 + d_1 \cdot \overline{\mu F}_3 + d_2 \cdot (\overline{\mu F}_3)^2\right] \times \\
& \times \left[1 + d_3 \frac{F_{жс}}{\sum \mu F_{ожс}} + d_4 \left(\frac{F_{жс}}{\sum \mu F_{ожс}}\right)^2\right] \cdot \left[1 + d_5 \overline{W} + d_6 (\overline{W})^2\right] \cdot \left[1 + e_1 \left(\frac{d_3}{D_3}\right) + e_2 \left(\frac{d_3}{D_3}\right)^2\right] \times \quad (1.5) \\
& \times \left(1 + e_3 \cdot e^{\overline{L_K}}\right) \cdot \left(i_1 + i_2 \frac{\sum \mu F_{охл}}{\sum \mu F_{ожс}}\right).
\end{aligned}$$

Зависимость 1.5 построена по результатам обработки данных по 30 камерам сгорания. Она учитывает влияние режимных и конструктивных параметров на уровень выбросов CO. Зависимость может применяться для широкого диапазона режимов: от малого газа до максимала.

За рубежом большую популярность приобрела зависимость выбросов CO, предложенная А. Лефевром [26, 76]:

$$EI_{CO} = \frac{86 \cdot \dot{m}_a T_{pz} e^{-0,00345 T_{pz}}}{(V_C - V_E) \sqrt{\frac{\Delta P}{P}} P^{1,5}}. \quad (1.6)$$

При построении выражения 1.6 в качестве главных факторов, определяющих уровень выбросов CO, были выбраны:

- разбавление продуктов сгорания воздухом за зоной горения;
- время пребывания топливовоздушной смеси в зоне горения;
- скорость реакций горения;
- скорость смешения.

За характерную температуру принята средняя температура в зоне горения.

В работе [76] показано, что выражение 1.6 неплохо предсказало уровень выбросов CO из камер сгорания двигателей F100 и F101.

Результаты расчета камеры сгорания энергетической газотурбинной установки ГТЭ-10/953 по зависимости 1.6 приведены на рисунке 4.24.

Основное достоинство расчетов по готовым полуэмпирическим зависимостям – относительная простота и быстрота вычислений. Для оценки

уровней выбросов вредных веществ не требуются «тяжелые» программные продукты.

Наличие в выражениях поправочных эмпирических коэффициентов может иметь как положительный, так и отрицательный характер. В случае, если конструкция исследуемой камеры сгорания схожа с камерами, «заложеными» в выражении, расчетная оценка «опирается» на экспериментальные данные. Напротив, существенное различие в конструкциях камер сгорания ограничивает применение полуэмпирических зависимостей.

Кроме того, такие выражения могут не учитывать локальные особенности течения. Например, чрезмерное охлаждение в пристеночной области приводит к повышенному уровню CO.

1.4.2 Вычислительная газовая динамика (CFD моделирование)

В настоящее время широкое применение у разработчиков камер сгорания получили программные продукты вычислительной газовой динамики (Computational Fluid Dynamics – CFD) [32, 16, 25, 38, 56, 89 и др.]. Наиболее известные из них: ANSYS Fluent, ANSYS CFX, Логос, FlowVision, Star-CCM+, Star-CD, OpenFOAM. Такие программные продукты позволяют выполнять трехмерные расчеты камер сгорания и снабжены инструментом обработки и визуализации результатов моделирования.

В CFD математическая модель исследуемого объекта решается с помощью численных методов. Математическая модель – это система дифференциальных уравнений законов сохранения массы, энергии, количества движения и т.д.

Разработка надежной математической модели камеры сгорания ГТД для оценки выбросов вредных веществ является сложной задачей. Необходимо оценить параметры турбулентности потока, скорости смешения топлива и воздуха, скорости химических реакций, характер взаимодействия реагирующего потока с турбулентным течением и течением в пристеночной области, параметры

теплоотовода от газа к стенкам камеры и др. С этой целью в CFD-программах заложено немало специализированных моделей.

Отметим некоторые проблемы и сложности CFD моделирования применительно к задаче оценки выбросов монооксида углерода из камер сгорания ГТД.

Первое, это *ограниченность прямого применения детальных механизмов химической кинетики* вычислительными возможностями современной техники. Прямое применение предполагает решение уравнений переноса для каждого из компонентов. Это существенно усложняет математическую модель. Так, при применении механизма GRI-Mech 3.0 математическая модель будет состоять более чем из 60 уравнений (53 уравнения переноса компонентов + 3 уравнения закона сохранения импульса для трех компонент скорости + уравнение сохранения энергии + уравнения модели турбулентности и др.).

Один из способов решения проблемы – это разработка моделей горения с допущениями, отделяющими «химию» от «газовой динамики» – например, модели семейства «Flamelet» (модель тонкого фронта пламени). Однако, здесь возникают вопросы касаясь справедливости таких допущений и о степени их влияния на результаты расчетов.

Для примера кратко и упрощенно (быть может с некоторой потерей точности) опишем основные концепции классической модели Flamelet горения диффузионных пламен.

Для построения модели Flamelet вводится параметр – переменная смешения Z (mixture fraction). Этот параметр характеризует состав смеси в каждой ячейке расчетной области и определяется количественным соотношением элементов (N, O, C, H ...). В виду того, что элементы не исчезают и не образуются, в уравнении переноса Z отсутствует источниковый член. Это большое преимущество такого подхода – отпадает необходимость моделирования источникового члена, что значительно упрощает расчеты.

Второй вводимый параметр – скорость диссипации скаляра χ (скорость диссипации Z). Этот параметр оценивает влияние поля течения на процессы

горения и косвенно характеризует локальное время пребывания горючей смеси. При критическом значении χ пламя погасает.

На базе этих параметров экспериментально, либо с помощью прямого численного моделирования определяется зависимость содержания компонентов от Z и χ ($g(i) = f(Z, \chi)$). Эти компоненты включают в себя основные продукты сгорания, а также вредные вещества (NO , NO_2 , CO , HC и др) и радикалы (O , H , OH и др.). Таким образом, по значениям Z и χ можно определить детальный состав продуктов сгорания.

Однако, наличие в турбулентном потоке пульсаций скорости и состава смеси приводит к необходимости осреднения по Z и χ для получения среднего значения количества того или иного компонента. Для решения этой задачи вводится функция распределения вероятностей (PDF – Probability Density Function). В свою очередь для интегрирования (осреднения) через PDF функцию необходимо ввести третий параметр – дисперсию переменной смешения (Z'^2).

Таким образом, при применении модели горения Flamelet, в расчетной области необходимо определить распределение параметров Z , Z'^2 и χ . Это большое достижение, т.к. количество уравнений переноса сократилось с десятков/сотен до трех. Детальный же состав смеси определяется по заранее подготовленным зависимостям (таблицам) $g(i) = f(Z, Z'^2, \chi)$.

Теперь рассмотрим некоторые проблемы модели Flamelet применительно к задаче расчета выбросов CO [89].

1. Построение экспериментальных либо расчетных зависимостей $g(i) = f(Z, \chi)$ выполняют для адиабатических условий. Соответственно большинство коммерческих CFD пакетов не учитывает влияние отвода теплоты на образование веществ. Отвод теплоты влияет только на температуру газа и, соответственно, на его плотность и скорость [59]. Однако, применительно к задаче расчета выбросов CO , такое допущение может привести к значительным неточностям. В особенности это существенно для относительно холодной пристеночной области.

2. Делается допущение о жесткой зависимости между составом смеси ($g(i)$) и параметрами Z и χ . Нужно отметить, что применительно к вредным веществам с

низкой концентрацией (NO , CO и др.), такое допущение часто выполняется не для всего диапазона изменений Z и χ . Имеются вопросы относительно повторяемости (воспроизводимости) результатов экспериментов, а также проблемы согласованности (совпадения) результатов у различных авторов.

3. Часто при осреднении количества того или иного вещества делается допущение о статистической независимости количества этого вещества от других компонентов и параметров. В частном случае, это означает, что осредненный уровень CO не зависит от пульсаций температуры и состава исходной смеси, что весьма спорное допущение. Однако учет статистической зависимости параметров значительно усложнит математическую модель настолько, что модель горения Flamelet потеряет преимущество в экономии вычислительных ресурсов.

Аналогичному анализу можно подвергнуть и другие продвинутое CFD модели горения.

В качестве второй общей проблемы CFD моделирования в части расчета выбросов монооксида углерода из камер сгорания ГТД можно выделить *широкий диапазон изменения временного масштаба образования/выгорания CO* .

Условно можно выделить две зоны – высокотемпературную зону пламени и низкотемпературную постпламенную (послепламенную) зону. В зоне пламени процессы образования/выгорания CO быстры. В постпламенной же зоне происходит медленное объемное догорание CO . Соответственно модели тонкого фронта пламени типа Flamelet неточно моделируют постпламенное – объемное горение, а модели объемного горения (например, EDC) требуют чрезмерного измельчения сетки в зоне пламени, что увеличивает вычислительную нагрузку.

Для решения этой проблемы рядом автором разработаны гибридные модели [25, 67], которые требуют модификации исходных («стандартных») моделей горения.

Третья проблема – *сложность моделирования турбулентности* в камерах сгорания ГТД.

Наиболее широкое распространение получили RANS модели турбулентности типа k - ϵ , SST и их модификации. Эти модели построены на

допущении о развитой изотропной турбулентности, что справедливо для течений во многих технических устройствах. Однако в основных камерах сгорания ГТД для стабилизации пламени организуют зону обратных токов (ЗОТ). ЗОТ характеризуется условной линией нулевых скоростей, где направление потока изменяется на обратное. Кроме того граница ЗОТ - это зона высоких температур, следовательно газ здесь горячий – вязкий (локальное число Рейнольдса может снизиться в пять раз из-за подвода теплоты [83]). Таким образом, моделирование границы ЗОТ осложняется малыми скоростями и большой вязкостью газа – это состояние не соответствует допущению о изотропной турбулентности RANS моделей. Как следствие, это приводит к сложности и неточности оценки поля скоростей за ЗОТ [83], что также сказывается на оценке выбросов вредных веществ.

Рассмотрены далеко не все проблемы CFD в плане расчета выбросов СО из камер сгорания ГТД. Однако, цель настоящего раздела не акцентировать недостатки CFD, а подчеркнуть, что CFD встречает свои трудности и не является единственным направлением развития методов расчетной оценки количества вредных веществ в продуктах сгорания. Актуально развитие альтернативных методов.

1.4.3 Реакторный метод

В реакторном методе рабочий объем камеры сгорания делится на зоны, которые моделируются отдельными реакторами [53, 57]. Наибольшее распространение получили модели реакторов идеального смешения (PSR – Perfectly Stirred Reactor [96]) и идеального вытеснения (PFR – Plug Flow Reactor [96]). Математические модели реакторов PSR и PFR относительно просты, т.к. построены на допущениях, сильно упрощающих структуру течения реагентов. Простота моделей позволяет применять в вычислениях «тяжелые» детальные механизмы химической кинетики, наиболее точно рассчитывающие скорость реакций. В тоже время чрезмерное упрощение газовой динамики не соответствует сложной трехмерной картине течения в «реальных» камерах сгорания. Это

ограничивает эффективность применения простых реакторных моделей для количественной оценки вредных выбросов [29]. В особенности это актуально для СО. На выбросы монооксида углерода влияет неоднородность горючей смеси, а она определяется локальными условиями смешения газов. Соответственно, требуются мероприятия, позволяющие реакторной модели более точно учитывать структуру течения камер сгорания.

Тем не менее, даже простые одно-двух реакторные модели нашли свое применение у разработчиков и исследователей камер сгорания ГТД. Классический пример такой модели – модель состоящая из реактора PSR и PFR. Реактор идеального смешения моделирует зону горения, следующий за ним реактор идеального вытеснения моделирует зону догорания топлива. Такие модели позволяют получить оценочный (предварительный) уровень выбросов вредных веществ и качественные зависимости их выбросов от различных факторов. Также можно оценить максимально возможный уровень выброса того или иного компонента (например, если сделать допущение, что все топливо сжигается в пламени со стехиометрическим составом, то можно оценить максимально возможный уровень выбросов NO_x).

1.4.4 Детальные и глобальные механизмы химической кинетики

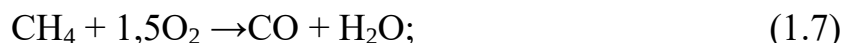
Различают детальные и глобальные механизмы химической кинетики.

Детальные механизмы химической кинетики включают в себя десятки и сотни компонентов и тысячи реакций. Применение таких механизмов позволяет достаточно точно рассчитать скорость химических реакций, скорость ламинарного пламени, время воспламенения и другие параметры, необходимые при моделировании горения.

В настоящей работе применяется детальный механизм GRI-Mech 3.0 [71] состоящий из 53 компонентов и 325 реакций. Он создан для расчета окисления природного газа (метана) и является наиболее распространённым механизмом для

этого топлива. GRI-Mech 3.0 оптимизирован для следующих диапазонов параметров: $T=1000-2500$ К; $p \leq 1,0$ МПа; $\alpha = 0,2-10,0$ [90].

При решении определенного класса задач можно обойтись «легкими» – глобальными механизмами химической кинетики. Например, механизмы сжигания метана BFER [60], Westbrook C.K. и Dryer F.L. [97] состоят из шести (с N_2) компонентов и двух реакций:



Такие механизмы позволяют производить быстрые расчеты, в том числе в CFD, с неплохой оценкой основных параметров горючей смеси (адиабатическая температура пламени, состав основных компонентов продуктов сгорания и др.). Однако, глобальные механизмы плохо применимы для оценки вредных выбросов.

На рисунке 1.10 приведены зависимости $T = f(\alpha)$ и $[CO] = f(\alpha)$ полученные по результатам расчета реактора идеального смешения объемом 4500 см^3 при начальной температуре горючей смеси 470 К, давлении 0,4 МПа и массовом расходе 2 кг/с. Расчеты выполнены для двух механизмов окисления метана в воздухе – детальный механизм GRI-Mech 3.0 и глобальный BFER (глобальный механизм BFER оптимизирован по оценке скорости ламинарного пламени и температуре продуктов сгорания для диапазонов параметров исходной смеси: $T = 300-700$ К, $p = 0,1-1,2$ МПа, $\alpha = 0,7-1,7$).

Из рисунка 1.10 видно существенное отличие между глобальным и детальным механизмом химической кинетики в части оценки выбросов CO. Например, при $\alpha \approx 1,6$ уровень монооксида углерода отличается на порядок.

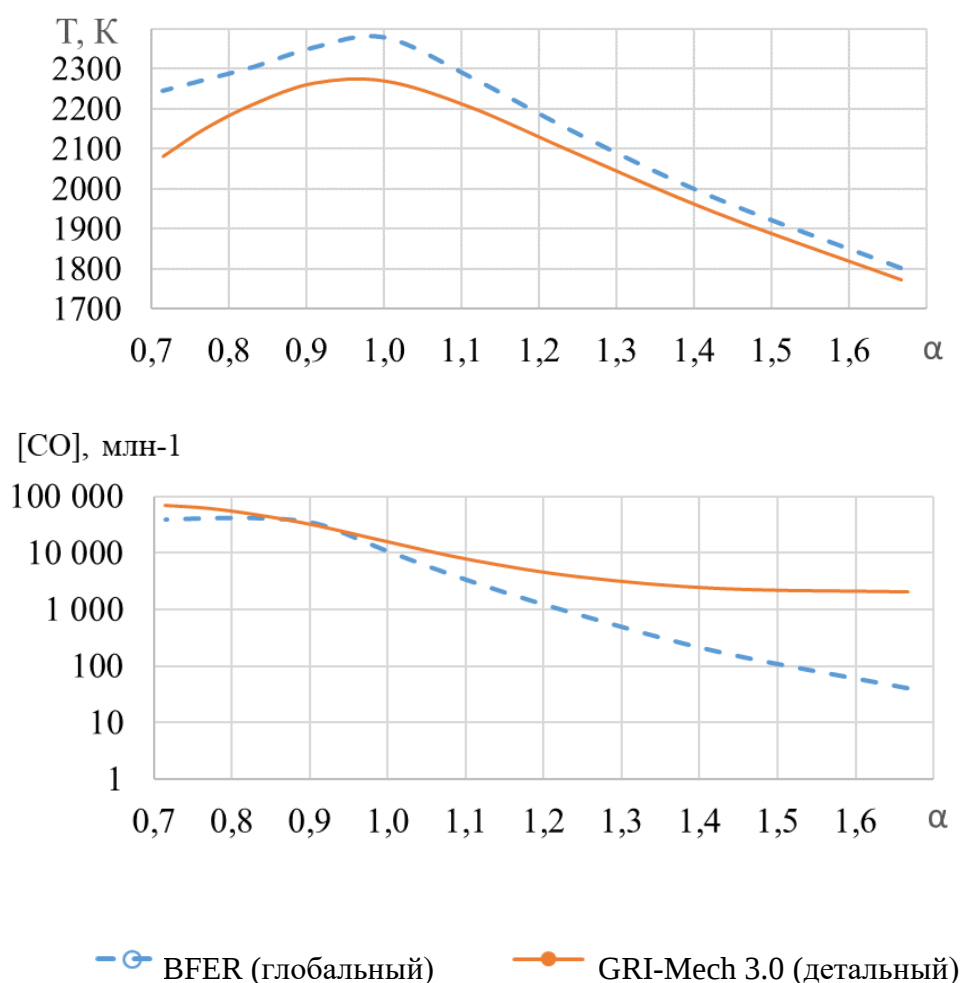


Рисунок 1.10 – Расчетная зависимость температуры и объемной доли CO на выходе из реактора идеального смешения от состава горючей смеси и механизма химической кинетики

Таким образом, для точной оценки выбросов CO из камер сгорания ГТД необходимо применять «тяжелые» детальные механизмы химической кинетики.

Выводы к первой главе

1 Ввиду постоянного увеличения потребления углеводородного топлива и ужесточения экологических норм допустимого содержания вредных веществ, в частности CO, в отработавших газах ГТД актуально развитие соответствующих методов расчета камер сгорания, т.к. именно камера сгорания определяет главным образом экологические характеристики двигателя.

2 Рассмотрены физико-химические факторы, влияющие на выбросы монооксида углерода (СО) из камер сгорания ГТД. Применительно к задаче расчета и снижения выбросов СО отмечено следующее:

2.1 По результатам расчетов с применением детальной химической кинетики получено, что при коэффициенте избытка воздуха на выходе из камеры сгорания $\alpha > 2$ равновесные значения СО не превышают $1-100 \text{ млн}^{-1}$ ($1,3-125 \text{ мг/нм}^3$) при исходной температуре горючей смеси $300-1060 \text{ К}$ (т.е. соответствуют отечественным ГОСТ). Однако, в камерах сгорания ГТД содержание монооксида углерода в продуктах сгорания всегда превышает их равновесные значения, что обусловлено неполным сгоранием топлива.

2.2 При оценке выбросов СО необходимо учитывать эффекты термической диссоциации в зонах с температурой более 1900 К в диапазоне давлений $0,5-10,0 \text{ МПа}$.

2.3 Построена расчетная зависимость времени самовоспламенения метановоздушной смеси от исходной температуры. Расчеты выполнены с применением детального механизма GRI-Mech 3.0. Получено, что при $T < 1400 \text{ К}$ время самовоспламенения горючей смеси превышает $\sim 1,0 \text{ мс}$, соответственно локальное время пребывания горючей смеси может оказаться недостаточным для завершения процессов горения. Таким образом, значение температуры $T \approx 1400 \text{ К}$ можно принять в качестве границы, соответствующей началу повышенного содержания СО в продуктах сгорания.

3 Определено, что расчетное количество СО в продуктах сгорания может отличаться на порядок при сравнении глобального и детального механизмов химической кинетики.

ГЛАВА 2 КОМБИНИРОВАННЫЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА ВЫБРОСОВ МОНООКСИДА УГЛЕРОДА ИЗ КАМЕР СГОРАНИЯ ГТД

2.1 Выбор комбинированного метода (CFD и реакторный метод) в качестве приоритетного

Выше было отмечено, что выделяют три основных метода расчетной оценки концентраций вредных веществ на выходе из камер сгорания: расчет по полуэмпирическим зависимостям и статистическим данным; реакторный метод и вычислительная газовая динамика (CFD).

Каждый метод сталкивается со сложностями при расчете выбросов СО.

Метод расчета по полуэмпирическим зависимостям «завязан» с конструктивными и режимными параметрами камер сгорания, на базе которых построены зависимости оценки выброса вредных веществ.

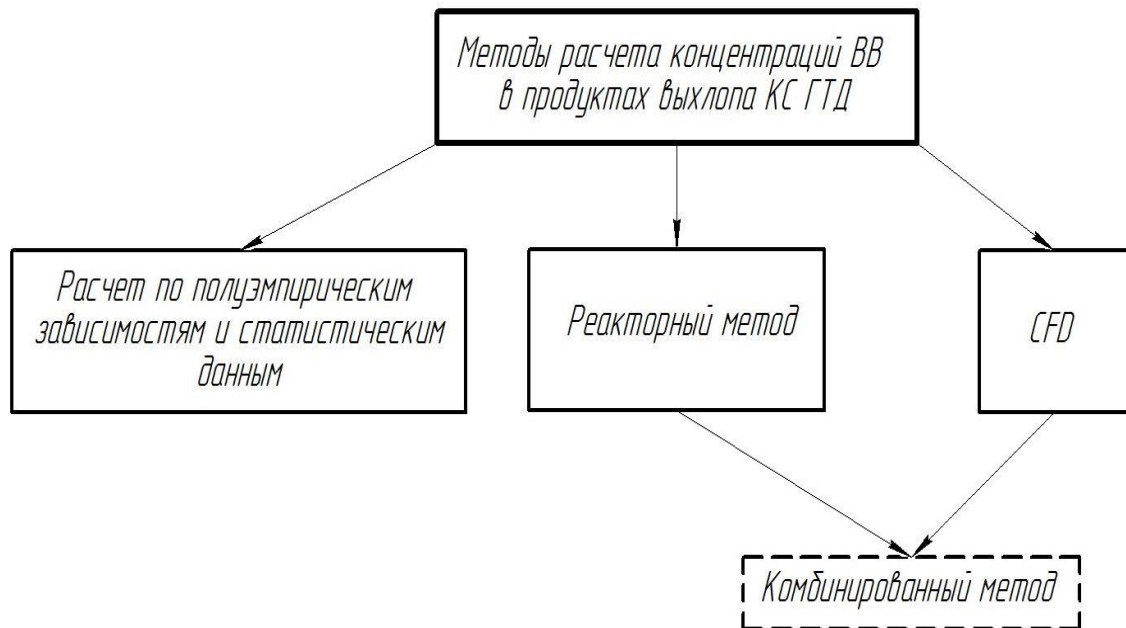
В CFD прямое применение детальных (многокомпонентных) механизмов химической кинетики требует чрезмерных вычислительных затрат, а математические модели с глобальной (упрощенной) кинетикой или с «разделением химии от газовой динамики» неточно оценивают, соответственно, скорости химических реакций и процессы образование/выгорание монооксида углерода в объеме постпламенной зоны.

В реакторном методе чрезмерное упрощение сложной пространственной структуры течения камер сгорания приводит к существенным ошибкам при оценке выбросов СО.

В настоящей работе в качестве приоритетной выбрана концепция создания комбинированных методов расчёта выбросов вредных веществ из камер сгорания (комбинируются CFD и реакторный метод).

В комбинированных методах расчета выбросов вредных веществ из камеры сгорания ГТД её реакторная модель строится на базе результатов трехмерного CFD моделирования (рисунок 2.1). Этот метод позволяет точнее учесть структуру

течения газов в камере сгорания с возможностью проведения быстрых вычислений с применением детальных механизмов химической кинетики [31, 15, 17, 18, 20, 24, 27, 45, 46, 54, 70, 74, 79-82, 84-86, 92, 95, 99, 100 и др.].



*ВВ – вредные вещества

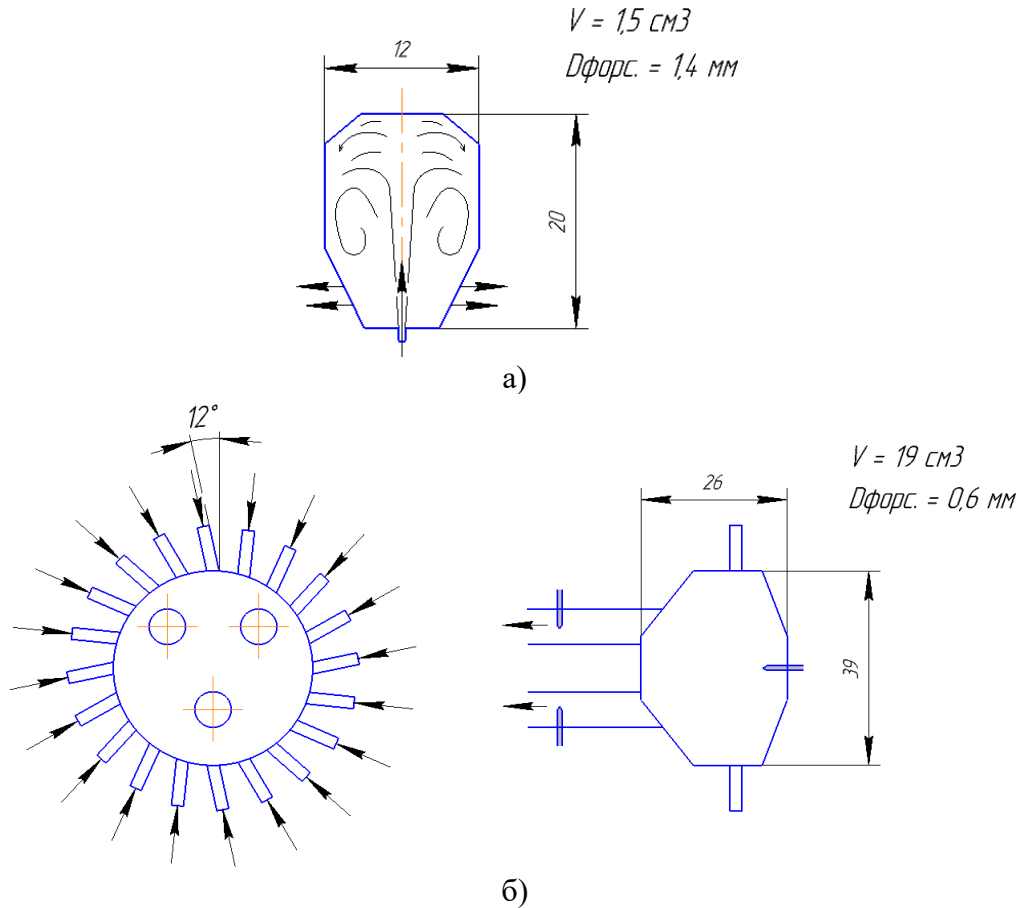
Рисунок 2.1 – Комбинированные методы расчета выбросов вредных веществ

Расчет реакторных моделей выполняют в специальных программных продуктах типа CANTERA, CHEMKIN, Chemical Workbench (Кинтех Лаб) и др. Некоторые научные организации используют программы собственной разработки.

2.2 Обзор работ, посвященных оценке выбросов монооксида углерода из камер сгорания ГТД по комбинированному методу

Прежде, чем переходить к разбору работ, посвященных оценке выбросов вредных веществ из камер сгорания ГТД, рассмотрим работы, в которых моделируются устройства, приближенные по условиям работы к гомогенному реактору. Эти работы интересны тем, что показывают насколько успешно одно-двухреакторные математические модели справляются с расчетом горелочных устройств интенсивного смешения.

В работах [92, 93, 61] исследовались две экспериментальные модели реактора интенсивного смешения: одноструйный и многоструйный (рисунок 2.2). Обе модели работали на заранее подготовленной метановоздушной смеси.



а) – одноструйный реактор, б) – многоструйный реактор

Рисунок 2.2 – Горелочные устройства интенсивного смешения

Экспериментальные исследования одноструйного реактора проведены при следующих условиях: температура в реакторе $\sim 1800 \text{ К}$; время пребывания горючей смеси $\tau = 0,5-4,0 \text{ мс}$; давление – 0,3, 0,47 и 0,65 МПа. Работали как с подогревом исходной горючей смеси, так и без подогрева. Температура газов в реакторе поддерживалась постоянной за счет изменения состава горючей смеси.

Экспериментальные исследования многоструйного реактора проведены при следующих условиях: температура в реакторе $\sim 1800 \text{ К}$; время пребывания горючей смеси $\tau = 1,0-2,0 \text{ мс}$; давление $p = 0,1-2,0 \text{ МПа}$; коэффициент избытка воздуха $\alpha = 1,82$. Работы проведены с подогревом исходной ТВС.

Измеренное содержание CO в продуктах выхлопа составило 100-6700 млн⁻¹.

Одноструйный реактор при малых значениях τ моделировался одним реактором PSR. При больших значениях времени пребывания реактор моделировался двумя последовательно расположенными PSR – первый для зоны пламени, второй для постпламенной зоны.

Многоструйный реактор моделировался цепью PSR – PFR (PSR – зона пламени, PFR – постпламенная зона и выхлопные патрубки до сечения отбора проб газа).

В расчетах применялся детальный механизм химической кинетики окисления метана – GRI-Mech 3.0.

Получено хорошее согласование расчетных концентраций CO с экспериментальными данными на режимах с давлением выше 0,5 МПа.

Успешное применение идеализированных моделей типа PSR и PFR при расчете горелочных устройств интенсивного смешения показало потенциальную возможность успешного моделирования более сложных устройств с помощью этих моделей.

Результаты обзора работ, посвященных оценке выбросов монооксида углерода из камер сгорания ГТД по комбинированному методу, приведены в таблице 2.1.

В таблице 2.1 выделено два направления разработки реакторных моделей камер сгорания.

Первое направление – разработка реакторной модели на базе трехмерной расчетной структуры потока. Здесь основные зоны рабочего процесса (зона пламени, зона рециркуляции, пристеночная зона, зона разбавления и др.) выявляются по результатам CFD-расчета и, в реакторной модели, выделяются отдельными реакторами или группами реакторов.

Второе направление – «алгоритмическое» или «автоматическое», при котором разрабатывается специальная программа обработки результатов CFD моделирования. Программа объединяет соседние расчетные ячейки в реакторы в зависимости от заданных критериев селекции, в качестве которых выступают

интервалы значений по температуре газов, составу смеси и др. – ячейки с параметрами газа в заданном интервале объединяются в один реактор.

Таблица 2.1 – Сводные результаты обзора расчетов камер сгорания

Работа	Конструкция	Топливо	Различие с экспериментом		Нэл
			NOx	CO	
Метод построения реакторной модели по структуре потока					
[79]	«простая» ¹ камера сгорания А	метан	-	δ = 15 %	8
[79]	«сложная» ² камера сгорания В	jet А	-	δ < 20 % режим малого газа δ > 100 % режим полной тяги	15+15
[79]	«сложная» камера сгорания D	jet А	-	δ < 20 % режим малого газа δ > 100 % режим полной тяги	18
[85]	«сложная»	природный газ	δ < 10 %	δ < 1 % ^{3,8}	31
[84]	«сложная»	метан	-	δ < 50 % α > 1,54 δ > 100 % α < 1,54	16
[86]	«сложная»	природный газ	δ < 25 %	δ > 100 % в отдельных точках	18
[45]	«сложная»	керосин	δ < 8 % ⁴	- ⁵	6
[68]	«сложная»	синтез-газ	δ < 27 %	δ = 40-60 %	12
[19]	«простая»	пропан	-	δ = 16 %	4
[82]	«простая»	природный газ	δ = 0-50 %	δ > 40 % режим малого газа δ < 7 % режим полной тяги	11
[82]	«простая»	синтез-газ	δ = 235 %	δ = 28 % ⁸	11
[73]	«простая»	метан	Δ ≈ 5 млн ⁻¹	δ = 9 - 80 %	5
«Автоматический» метод построения реакторной модели					
[27] ⁶	«простая»	природный газ; суррогат керосина	-	δ = 10-20 %	320
[27] ⁶	«сложная»	суррогат керосина	-	δ ≈ 20 % ⁸	100
[66] ⁷	«сложная»	метан	-	δ > 50 %	5551
[73]	«простая»	метан	Δ ≈ 5 млн ⁻¹	δ = 7 - 80 %	7, 16, 62

Продолжение таблицы 2.1

Примечание

- 1 «простая» конструкция – без подвода вторичного воздуха в зону горения
- 2 «сложная» конструкция – с подводом вторичного воздуха в зону горения
- 3 $[\text{CO}]_{\text{расч}} \approx [\text{CO}]_{\text{экс}} \approx 2 \text{ млн}^{-1}$
- 4 на режимах с малым содержанием NO_x ($\text{EINO}_x < 2$) различие достигает $\sim 30 \%$
- 5 авторы работы [45] отмечают необходимость повышения точности расчетов выбросов CO
- 6 реакторы формировались по распределению температуры и топлива
- 7 реакторы формировались по распределению температуры и осевой составляющей скорости
- 8 приведены результаты расчетов выбросов CO для отдельного (единичного) режима

По результатам обзора отметим следующее [24].

1. Хорошее согласование расчетных выбросов CO с экспериментом (расхождение менее 25 %) получено для камер сгорания с упрощенной конструкцией (без подвода вторичного воздуха в зону горения). Для экспериментальных моделей, близких по сложности конструкции к камерам сгорания ГТД, согласование расчета с экспериментом неудовлетворительно, либо представлено сравнение лишь на одном режиме.

2. Рядом авторов отмечено, что для повышения точности расчетной оценки выбросов CO необходимо учитывать неоднородность горючей смеси по составу [68, 84-86]. Так в работах [68, 85] течение на выходе из горелки разделяется на три потока для учета радиальной неравномерности. Также многие авторы отдельно моделируют «бедную» низкотемпературную пристеночную зону.

3. В работе [79], при моделировании кольцевой камеры сгорания «В» реакторная сеть строилась для двух продольных сечений: первое – в следе за горелками; второе – в зоне между горелками. Такой подход позволяет более детально учесть недогорание CO в «бедной» зоне между горелками при большом расстоянии между ними.

4. Время пребывания горючей смеси в элементах реакторной модели составляет 1-3 мс, это позволяет получить устойчивое горение даже в самых «бедных» реакторах [45, 84].

5. Авторы работы [45] выделяют две основные проблемы создания реакторных моделей диффузионных камер сгорания: моделирование зоны пламени и моделирование пристеночной области.

Пристеночная область, в работе [45], моделируется двумя параллельно расположенными реакторами. Первый моделирует зону непосредственно у стенки, второй более «богатую» зону на некотором удалении от стенки.

6. В работе [19] отмечено, что при $\alpha > 1,5-1,8$ выбросы СО из исследуемой малогабаритной камеры сгорания большей частью вызваны «замораживанием» процессов горения в «бедной» и относительно холодной пристеночной области.

7. Рассмотрены расчеты трубчатых и кольцевых, прямоточных и противоточных камер сгорания, камер сгорания с отдельной подачей топлива и подачей подготовленной ТВС, а также камер со сложной конструкцией фронтального устройства – с организацией подвода пилотного топлива, с несколькими завихрителями и т.д.

8. Диапазоны изменения рабочих параметров исследуемых камер сгорания: $p = 0,1-2,0$ МПа; $T_{вх} = 300-733$ К; $\alpha_{\Sigma} = 1,1-3,0$.

В качестве топлива применялись метан, природный газ, пропан, синтез-газ, авиационный керосин, суррогат керосина.

9. В CFD наибольшее применение нашли RANS модели турбулентности.

10. Механизм GRI-Mech 3.0 наиболее распространен в расчетах реакторных моделей камер сгорания, работающих на метане и природном газе.

11. В рассмотренных работах расчетные модели камер сгорания построены с помощью реакторов идеального смешения PSR и идеального вытеснения PFR. (Существуют также различные вариации математической модели реактора неполного смешения PaSR (Partially Stirred Reactor). PaSR позволяет учесть влияние процессов смешения на образование вредных веществ. Однако, математическая модель такого реактора менее однозначна, существенно сложнее и требует применения стохастических (вероятностных) процессов. Это значительно увеличивает расчетное время. Например, если реактор идеального смешения рассчитывается менее чем за одну секунду, то при прочих равных, расчет реактора неполного смешения займет несколько минут [70]. Ввиду этих причин, в настоящее время, PaSR менее распространен.)

12. Количество реакторов варьируется от 4 до 31 при построении реакторной модели на базе структуры потока и от нескольких сотен до нескольких тысяч при «автоматическом» построении. Однако увеличение количества реакторов не обязательно приводит к повышению точности оценки выбросов СО. Предположительно, это вызвано некорректной оценкой розжига/нерозжига смеси в «бедных» реакторах. Большое количество таких реакторов в «автоматически» построенной модели может усложнить оценку образования/выгорания монооксида углерода.

В работе [73] также отмечено, что увеличение количества реакторов не привело к повышению точности оценки выбросов СО. Сравнивались реакторные модели построенные «вручную» ($N_{эл} = 5$) и «автоматически» с помощью программного пакета ANSYS Energico ($N_{эл} = 7, 16, 62$). Предпочтение отдано моделям с меньшим количеством реакторов.

В дополнение к работам, указанным в таблице 2.1, можно привести работы [91, 95] в которых отмечены сложности корректной оценки выбросов СО.

В работах [45, 84, 85] использован некоммерческий код собственной разработки, в работах [68, 73, 86, 91, 95] использован CHEMKIN, в работах [19, 79] использована CANTERA, в работе [27] использован ANSYS Fluent, в работе [73] ANSYS Energico, в [82] – Simulink, в [66] – KPPSMOKE.

Результаты обзора показали необходимость формализации процесса построения реакторной модели камеры сгорания по структуре течения, полученной по результатам трехмерного моделирования. Необходимо сформировать и систематизировать критерии и процедуры построения реакторной модели (в настоящее время процесс разработки реакторных моделей во многом основан на личном опыте исследователей).

Таким образом, актуальна задача развития комбинированного метода (CFD и реакторный метод) расчета выбросов СО из камер сгорания ГТД с целью повышения его точности, для чего, в первую очередь, необходимо более детально учитывать неоднородность горючей смеси по составу.

2.3 Математическая модель реактора идеального смешения (PSR)

В модели реактора идеального смешения PSR (Perfectly Stirred Reactor) делается допущение об идеальном (бесконечно быстром и полном) смешении реагентов во всем объеме реактора (рисунок 2.3). От реактора в окружающее пространство может отводиться некоторое количество теплоты q_w , или наоборот, подводиться к нему. Процессы горения, температура, состав горючей смеси в таком реакторе определяются скоростью химических реакций, временем пребывания горючей смеси и теплообменом с окружающей средой.

Математическая модель PSR состоит из уравнений сохранения массы и энергии с добавлением уравнения состояния идеального газа [96].

Запишем уравнение сохранения массы для i -го компонента смеси в контрольном объеме (в объеме реактора)

$$\frac{dm_{i,cv}}{dt} = \dot{m}_i^S V + \dot{m}_{i,in} - \dot{m}_{i,out}. \quad (2.1)$$

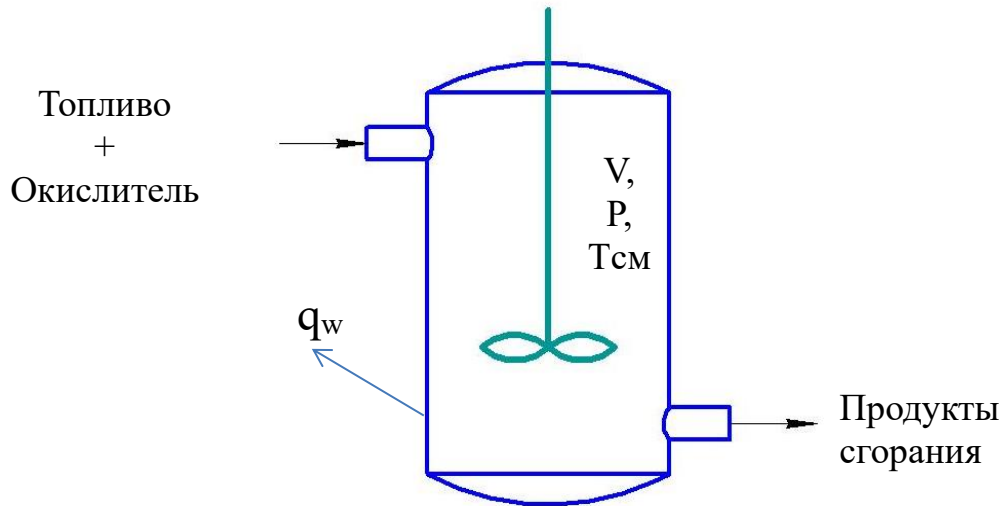


Рисунок 2.3 – Реактор идеального смешения

Здесь, $\frac{dm_{i,cv}}{dt}$ – скорость, с которой i -тый компонент аккумулируется в контрольном объеме, $\dot{m}_i^S V$ – скорость образования/выгорания i -го компонента

ввиду химических реакций, $\dot{m}_{i,in}$ и $\dot{m}_{i,out}$ массовый расход i -го компонента на входе и выходе из реактора.

При стационарном режиме работы реактора $\frac{dm_{i,cv}}{dt} = 0$.

Распишем член $\dot{m}_i^S V$ через объемную скорость образования i -го компонента ω_i (кмоль/(м³с)):

$$\dot{m}_i^S \cdot V = \omega_i M_i \cdot V, \quad (2.2)$$

где M_i – молярная масса i -го компонента;

V – объем.

Распишем уравнение 2.1 с учетом 2.2 и того, что $\dot{m}_i = g_i \cdot \dot{m}$:

$$\omega_i M_i \cdot V + \dot{m}(g_{i,in} - g_{i,out}) = 0. \quad (2.3)$$

Уравнение энергии:

$$\dot{Q} = \dot{m}(h_{out} - h_{in}) = \dot{m} \left(\sum_{i=1}^N g_{i,out} h_{i,out} - \sum_{i=1}^N g_{i,in} h_{i,in} \right). \quad (2.4)$$

Время пребывания горючей смеси в объеме реактора:

$$\tau = \frac{\rho V}{\dot{m}}. \quad (2.5)$$

Уравнение состояния идеального газа:

$$\rho = \frac{p}{RT}. \quad (2.6)$$

Реактором PSR рекомендуется моделировать зоны с интенсивным смешением и большими градиентами скоростей – зона пламени, ЗОТ, зоны подвода основного воздуха.

Отметим, что в зарубежной литературе также встречается обозначение реактора идеального смешения как CSTR (Continuous Stirred-Tank Reactor) или WSR (Well Stirred Reactor).

2.4 Математическая модель реактора идеального вытеснения (PFR)

Реактор идеального вытеснения PFR (Plug Flow Reactor) [96] можно представить в виде трубчатого канала, в который подается готовая ТВС (рисунок 2.4). При движении вдоль трубчатого канала происходит постепенное выгорание смеси. При этом делается допущение об идеальном смешении в поперечных сечениях, т.е. в поперечных сечениях состав смеси однороден, а параметры одинаковы (одномерное течение). Принимается допущение об отсутствии трения.

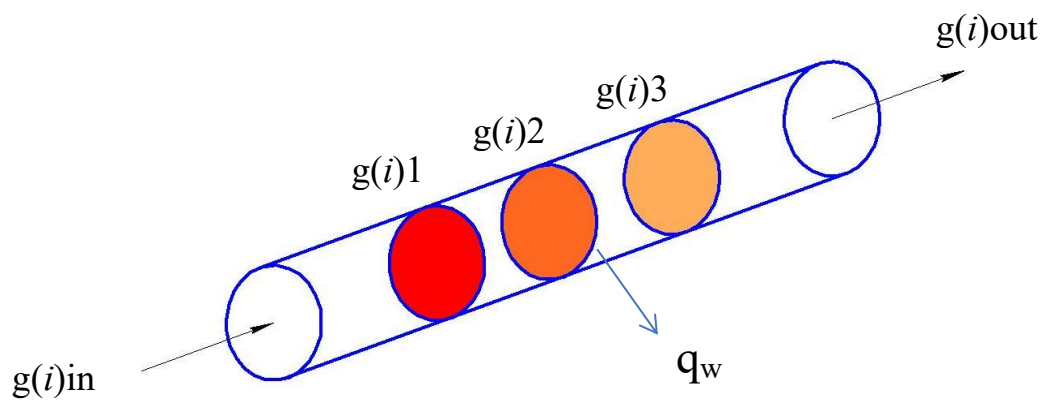


Рисунок 2.4 – Реактор идеального вытеснения

От реактора в окружающее пространство может отводиться некоторое количество теплоты q_w или наоборот.

Математическая модель реактора PFR включает в себя уравнения сохранения массы, импульса, энергии, баланса компонентов с добавлением уравнения состояния идеального газа [96].

Уравнение сохранения массы:

$$\frac{d(\rho u A)}{dx} = 0. \quad (2.7)$$

Уравнение сохранения импульса:

$$\frac{dp}{dx} + \rho u \frac{du}{dx} = 0. \quad (2.8)$$

Уравнение энергии:

$$\frac{d(h + u^2/2)}{dx} + \rho u \frac{q_w \cdot \Pi}{\dot{m}} = 0. \quad (2.9)$$

Здесь q_w – тепловой поток, Π – локальный периметр реактора.

Баланс компонентов:

$$\frac{dg_i}{dx} - \frac{\dot{\omega}_i M_i}{\rho u} = 0. \quad (2.10)$$

Реактором PFR рекомендуется моделировать зоны с относительно равнонаправленным течением – газосборник камеры сгорания, секции без отверстий подвода основного воздуха.

2.5 Расчетное исследование влияния отдельных факторов на уровень выбросов СО из камер сгорания ГТД с помощью комбинированного метода (CFD и реакторный метод)

На начальном этапе настоящей работы выполнено расчетное исследование влияния отдельных факторов на уровень выбросов монооксида углерода из камер сгорания ГТД [19].

Расчеты выполнены применительно к модели малогабаритной камеры сгорания (рисунок 2.5).

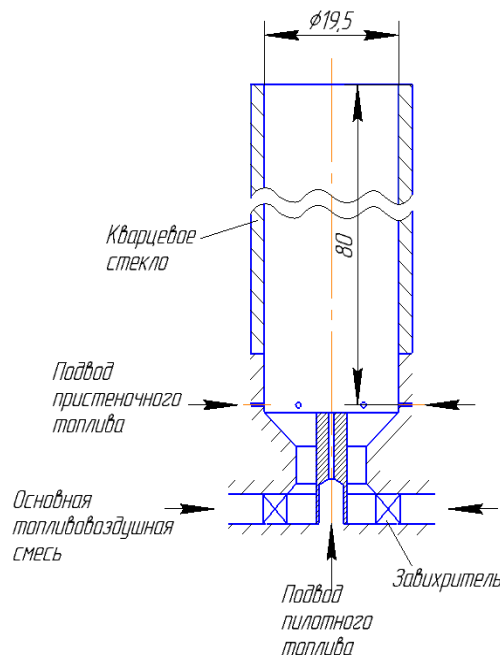


Рисунок 2.5 – Схема исследуемой камеры сгорания

CFD моделирование выполнено с моделью турбулентности SST и моделью горения Eddy Dissipation – Finite Rate Chemistry (EDM/FRC) с двухшаговым механизмом окисления пропана [97]. Суммарное количество расчетных элементов составило порядка 5 млн.

На базе результатов CFD моделирования построена реакторная модель камеры сгорания, состоящая из четырех реакторов (рисунок 2.6). Реактор PSR моделировал ЗОТ, расположенный следом за ним реактор PFR моделировал зону догорания. В модели отдельно выделяется пристеночная зона для повышения точности оценки выбросов CO (реактор идеального смешения «PSRw» и реактор идеального вытеснения «PFRw»).

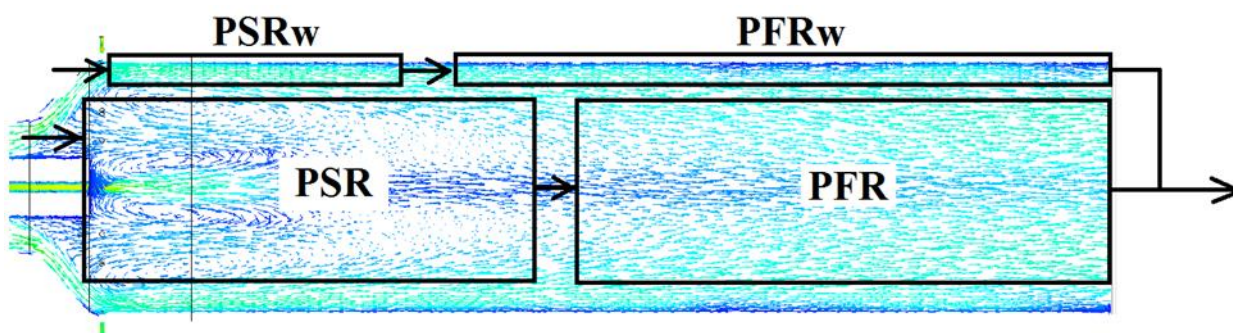


Рисунок 2.6 - Вектора скоростей и реакторная модель камеры

В пристеночном реакторе PSRw горючая смесь разжигалась, а в реакторе PFRw учитывался теплоотвод в стенку. Для определения теплового потока использовались критериальные зависимости при течении газов внутри и снаружи трубы [30, 33] с учетом теплового излучения газов ($\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$) к стенкам жаровой трубы [26]. Сделано допущение, что температура пристеночного газа соответствует адиабатической температуре горючей смеси, состав которой получен по результатам CFD моделирования.

В расчетах применялся детальный механизм химической кинетики окисления пропана San Diego 2005 [62], включающий в себя 46 компонентов и 235 реакций.

Некоторые результаты расчетов приведены в таблице 2.2.

Таблица 2.2 – Результаты расчетов ($p = 0,1$ МПа; $\alpha_\Sigma = 2,0$; $T_{\text{вх}} = 300$ К)

Параметр	Значение
Концентрация монооксида углерода на выходе из камеры $[\text{CO}]_{\text{вых}}$, млн^{-1}	84

Продолжение таблицы 2.2

Параметр	Значение
Равновесная концентрация монооксида углерода на выходе из камеры $[\text{CO}]_{\text{равн}}$, млн ⁻¹	1
Объемная доля O_2 на выходе из камеры	0,105
Объемная доля H_2O на выходе из камеры	0,078
Объемная доля CO_2 на выходе из камеры	0,058
Адиабатическая температура газа на выходе из камеры T_{adia} , К	1511
Температура газа в пристеночной области $T_{\text{w gas}}$, К	1355
Коэффициент теплопередачи k , Вт/(м ² К)	10,4

Измеренная концентрация монооксида углерода на выходе из камеры сгорания составила порядка 100 млн⁻¹ [98], т.е. расхождение реакторной модели с экспериментом – около 15 %. По результатам CFD моделирования, с глобальной химической кинетикой, $[\text{CO}]_{\text{вых}} = 5700$ млн⁻¹.

По разработанной реакторной модели камеры сгорания выполнено расчетное исследование влияния отдельных факторов на выбросы CO.

Расчетные зависимости выбросов монооксида углерода от состава смеси и адиабатической температуры продуктов сгорания приведены на рисунках 2.7, 2.8 и в таблицах 2.3, 2.4.

Расчеты выполнены для двух значений температуры воздуха на входе в камеру – 300 К и 600 К. При этом условное время пребывания топлива и давление в жаровой трубе сохранялось постоянным ($\tau = 36$ мс, $P = 0,1$ МПа), для чего расход горючей смеси на режиме с $T_{\text{вх}}=600$ К был уменьшен (так как с ростом температуры уменьшается плотность смеси).

Условия охлаждения жаровой трубы – естественная конвекция в атмосферных условиях ($T_{\text{охл}} = 300$ К).

В расчетах на режимах с «бедным» составом смеси минимальный объем реактора PSRw подбирался, исходя из обеспечения розжига смеси. Чем «беднее» смесь, тем больше отношение объема реактора PSRw (V_{PSRw}) к объему всей пристеночной области V_{w} .

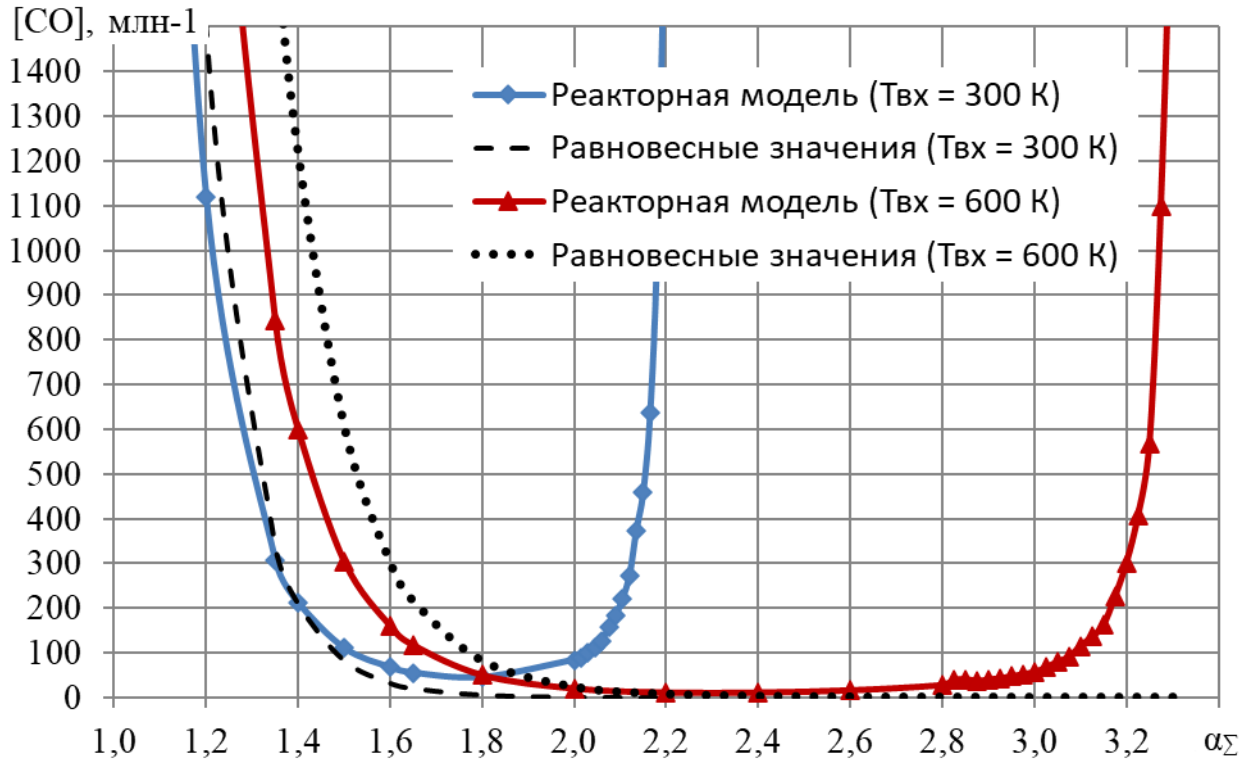


Рисунок 2.7 - Зависимость выбросов CO от суммарного коэффициента избытка воздуха и температуры воздуха на входе в

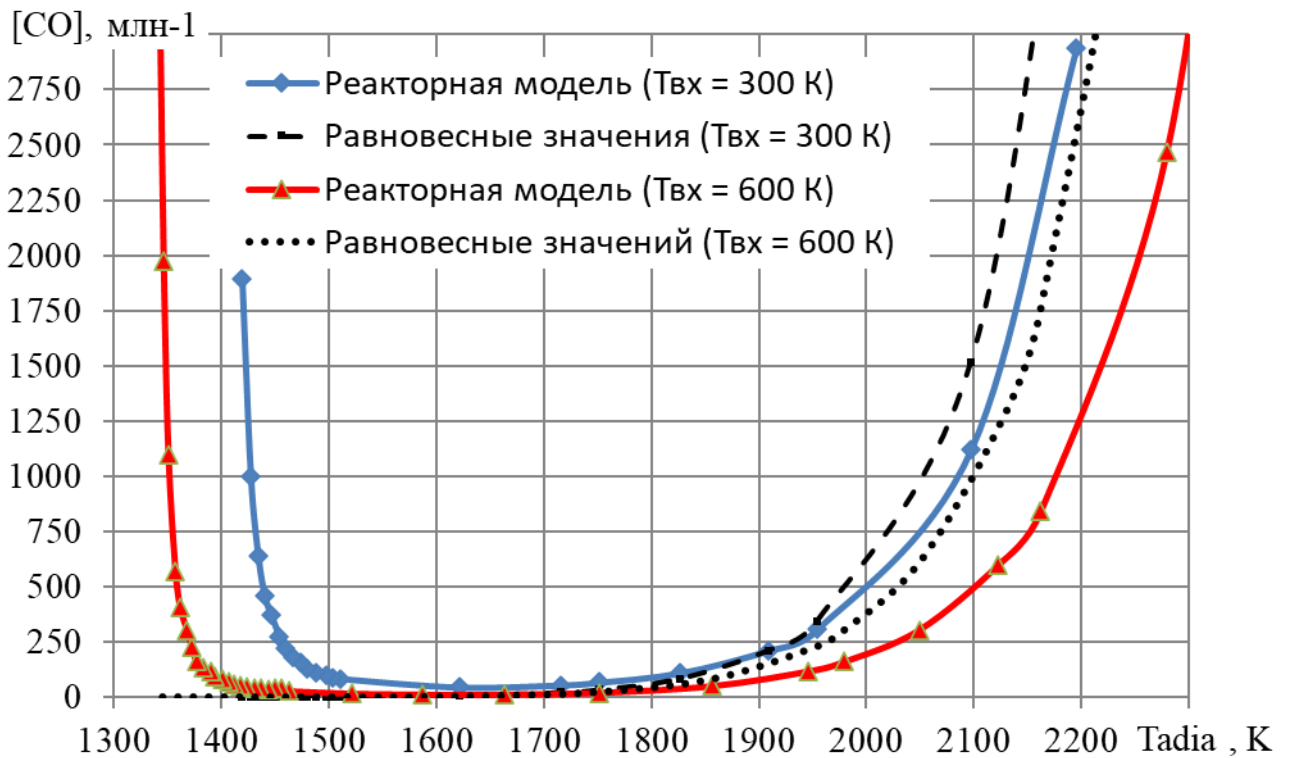


Рисунок 2.8 - Зависимость выбросов CO от адиабатической температуры газов на выходе из камеры сгорания

Таблица 2.3 – Зависимость выбросов СО от состава смеси ($T_{\text{вх}} = 300 \text{ К}$, $T_{\text{охл}} = 300 \text{ К}$)

α_{Σ}	$[\text{CO}]_{\text{вых}}, \text{ млн}^{-1}$	$[\text{CO}]_{\text{равн}}, \text{ млн}^{-1}$	$[\text{CO}]_{\text{w}}/[\text{CO}]_{\text{вых}}$	$V_{\text{PSRw}}/V_{\text{w}}$	$T_{\text{adia}}, \text{ К}$	$T_{\text{w gas}}, \text{ К}$	$k, \text{ Вт}/(\text{м}^2\text{К})$
1,1	2938	4245	0,58	0,278	2195	1961	13,7
1,2	1120	1516	0,61	0,278	2097	1867	12,9
1,35	307	345	0,74	0,278	1954	1738	12,3
1,4	212	212	0,80	0,278	1909	1702	11,9
1,5	110	84	0,93	0,278	1827	1628	11,7
1,6	67	33	1,06	0,278	1751	1565	11,1
1,65	55	21	1,13	0,278	1716	1533	11,2
1,8	45	6	1,29	0,278	1621	1453	10,5
2	84	1	1,42	0,278	1511	1355	10,4
2,015	88	1	1,43	0,307	1503	1350	10,3
2,03	99	1	1,44	0,321	1497	1343	10,3
2,045	112	1	1,45	0,335	1488	1337	10,2
2,06	127	1	1,46	0,362	1480	1332	10,1
2,075	156	1	1,46	0,404	1474	1324	10,1
2,09	183	1	1,46	0,432	1466	1318	10
2,105	221	0	1,47	0,474	1460	1312	10
2,12	273	0	1,47	0,516	1454	1306	10
2,135	374	0	1,47	0,558	1446	1299	9,9
2,15	460	0	1,48	0,613	1440	1292	9,8
2,165	636	0	1,48	0,669	1434	1285	9,8
2,18	998	0	1,48	0,753	1427	1274	9,8
2,2	1892	0	1,48	0,836	1419	1255	9,7

Таблица 2.4 – Зависимость выбросов СО от состава смеси ($T_{\text{вх}} = 600 \text{ К}$, $T_{\text{охл}} = 300 \text{ К}$)

α_{Σ}	$[\text{CO}]_{\text{вых}}, \text{ млн}^{-1}$	$[\text{CO}]_{\text{равн}}, \text{ млн}^{-1}$	$[\text{CO}]_{\text{w}}/[\text{CO}]_{\text{вых}}$	$V_{\text{PSRw}}/V_{\text{w}}$	$T_{\text{adia}}, \text{ К}$	$T_{\text{w gas}}, \text{ К}$	$k, \text{ Вт}/(\text{м}^2\text{К})$
1,1	5085	10269	0,32	0,278	2352	1991	16,4
1,2	2469	5091	0,27	0,278	2279	1910	15,8
1,35	843	1751	0,24	0,278	2162	1790	15,6
1,4	599	1216	0,25	0,278	2122	1762	15,3
1,5	304	605	0,28	0,278	2049	1705	14,7
1,6	160	301	0,33	0,278	1979	1644	14,7
1,65	117	215	0,36	0,278	1946	1620	14,5
1,8	50	81	0,48	0,278	1856	1550	14,3
2	20	23	0,75	0,278	1751	1478	13,5
2,2	11	7	1,09	0,278	1663	1411	13,2
2,4	11	2	1,27	0,278	1587	1352	13
2,6	16	1	1,44	0,278	1521	1301	12,9
2,8	28	0	1,46	0,278	1462	1261	12,5
2,825	39	0	1,46	0,278	1456	1256	12,4
2,85	41	0	1,46	0,278	1450	1254	12,2
2,875	37	0	1,43	0,278	1443	1246	12,4
2,9	40	0	1,45	0,278	1437	1241	12,3
2,925	43	0	1,47	0,278	1431	1235	12,5
2,95	47	0	1,47	0,278	1424	1230	12,5

Продолжение таблицы 2.4

α_{Σ}	$[\text{CO}]_{\text{вых}}, \text{млн}^{-1}$	$[\text{CO}]_{\text{равн}}, \text{млн}^{-1}$	$[\text{CO}]_{\text{w}}/[\text{CO}]_{\text{вых}}$	$V_{\text{PSRw}}/V_{\text{w}}$	$T_{\text{adia}}, \text{K}$	$T_{\text{w gas}}, \text{K}$	$k, \text{Вт}/(\text{м}^2\text{K})$
2,975	52	0	1,48	0,278	1418	1225	12,5
3	57	0	1,46	0,278	1411	1222	12,4
3,025	67	0	1,46	0,307	1407	1216	12,4
3,05	80	0	1,48	0,335	1400	1211	12,4
3,075	91	0	1,48	0,362	1394	1208	12,3
3,1	115	0	1,47	0,404	1390	1202	12,3
3,125	136	0	1,49	0,432	1383	1200	12,2
3,15	162	0	1,48	0,474	1377	1195	12,2
3,175	226	0	1,48	0,544	1372	1189	12,2
3,2	301	0	1,48	0,599	1368	1182	12,4
3,225	406	0	1,48	0,655	1361	1178	12,3
3,25	568	0	1,48	0,711	1357	1172	12,3
3,275	1100	0	1,48	0,808	1351	1160	12,3
3,3	1973	0	1,48	0,892	1346	1146	12,3
3,325	3438	0	1,48	0,990	1342	1120	12,2

Отметим, что расчетная закономерность выбросов СО от α_{Σ} согласуется с экспериментом. Это прослеживается по экспериментальной зависимости полноты сгорания топлива от состава смеси, приведенной в работе [98] (для $T_{\text{вх}} = 300 \text{ K}$):

- при $\alpha_{\Sigma} = 1,6\text{-}2,0$ получена высокая полнота сгорания ($\eta_{\text{г}} \approx 0,999$);
- при $\alpha_{\Sigma} = 2,2$ полнота сгорания понижается до $\eta_{\text{г}} \approx 0,996$;
- при $\alpha_{\Sigma} > 2,2$ наблюдается резкое уменьшение полноты сгорания (ввиду приближения к границе «бедного» срыва пламени).

Из рисунка 2.8 видно, что увеличение $T_{\text{вх}}$ с 300 до 600 K расширило границы работы камеры сгорания при низких выбросах СО, что согласуется с экспериментальными данными, ранее рассмотренными в настоящей работе.

Зависимость выбросов монооксида углерода от температуры газов в пристеночной области приведена на рисунке 2.9 (зависимость построена по данным таблиц 2.3 и 2.4).

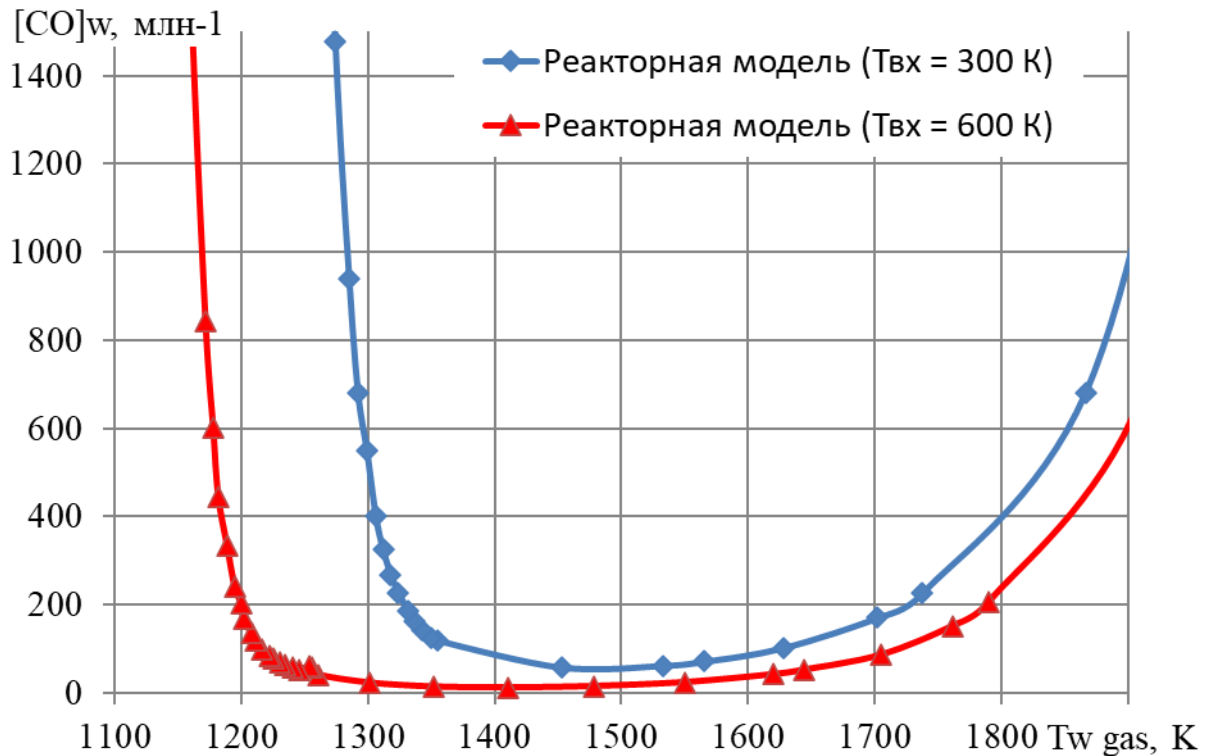


Рисунок 2.9 – Зависимость выбросов CO от температуры газов в пристеночной области

Согласно расчетам при температуре газов в пристеночной области менее ~ 1350 К для $T_{вх} = 300$ К и ~ 1250 К для $T_{вх} = 600$ К получено быстрое увеличение уровня выбросов монооксида углерода, что согласуется с ранее проведенными исследованиями. Так, например, в работе [64] показано, что скорость основной реакции окисления монооксида углерода $CO + OH \rightarrow CO_2 + H$ падает на два порядка при снижении температуры с 1800 К, характерной для зоны горения, до 1100-1200 К, характерной для пристеночной области.

В таблицах 2.3, 2.4 приведено отношение концентраций монооксида углерода в пристеночной области $[CO]_w$ к концентрациям на выходе из камеры $[CO]_{вых}$. Видно, что для исследуемой малогабаритной камеры сгорания «замораживание» реакций горения в пристеночной области является основной причиной выбросов CO при $\alpha_{\Sigma} > 1,5-1,8$.

Расчетная зависимость выбросов монооксида углерода от давления в камере сгорания приведена на рисунке 2.10 и в таблице 2.5. В расчетах с повышением давления увеличивался расход горючей смеси так, чтобы условное время пребывания топлива в жаровой трубе оставалось постоянным.

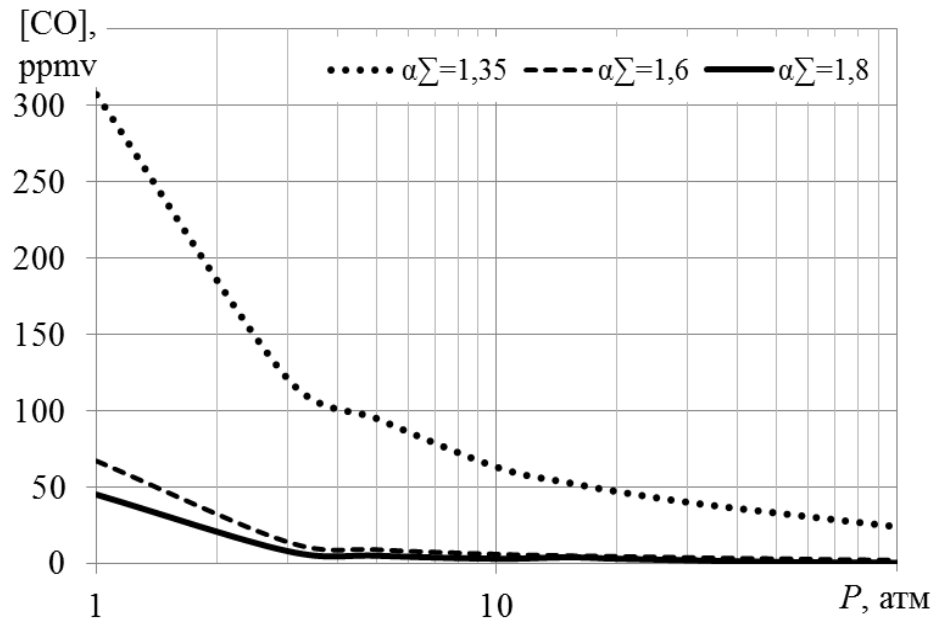


Рисунок 2.10 – Зависимость выбросов CO от давления в камере сгорания

Таблица 2.5 – Зависимость выбросов CO от давления (p) в камере сгорания

α_Σ	Параметр	p , МПа								
		0,1	0,3	0,5	1,0	1,5	2,0	3,0	5,0	10,0
1,35	$[\text{CO}]_{\text{вых}}, \text{млн}^{-1}$	307	121	95	63	53	47	40	33	24
	$[\text{CO}]_{\text{равн}}, \text{млн}^{-1}$	340	201	157	112	92	80	66	51	36
	$T_{\text{adia}}, \text{K}$	1953	1955	1956	1957	1958	1958	1959	1959	1960
	$k, \text{Вт}/(\text{м}^2\text{K})$	12	22	30	89	106	118	135	153	177
1,60	$[\text{CO}]_{\text{вых}}, \text{млн}^{-1}$	67	14	9	6	5	4,5	3,8	3	2
	$[\text{CO}]_{\text{равн}}, \text{млн}^{-1}$	33	19	15	11	9	8	6	5	3
	$T_{\text{adia}}, \text{K}$	1751	1751	1752	1752	1752	1752	1752	1752	1752
	$k, \text{Вт}/(\text{м}^2\text{K})$	11	20	58	81	95	105	119	134	145
1,80	$[\text{CO}]_{\text{вых}}, \text{млн}^{-1}$	45	8	5	3	4	3	2	1	1
	$[\text{CO}]_{\text{равн}}, \text{млн}^{-1}$	6	3	3	2	2	1	1	1	1
	$T_{\text{adia}}, \text{K}$	1621	1621	1621	1621	1621	1621	1621	1621	1621
	$k, \text{Вт}/(\text{м}^2\text{K})$	11	18	55	76	88	97	109	121	134

По результатам расчетов получено, что с ростом давления уровень выбросов монооксида углерода уменьшается.

Рассмотренная выше работа выполнена на начальных этапах исследования. Здесь расчеты не содержат мероприятия по уточнению влияния неоднородности состава горючей смеси на выбросы CO (нет отслеживания «бедных» струек). Однако, результаты расчетов показали перспективность и целесообразность развития комбинированного метода расчета выбросов вредных веществ из камер сгорания ГТД.

Выводы ко второй главе

1 В настоящей работе в качестве приоритетной выбрана концепция создания комбинированных методов расчёта выбросов вредных веществ из камер сгорания (комбинируются CFD и реакторный метод).

В комбинированном методе расчета выбросов вредных веществ из камеры сгорания ГТД ее реакторная модель строится на базе результатов трехмерного CFD моделирования. Этот метод позволяет точнее учесть структуру течения газов в камере сгорания с возможностью проведения быстрых вычислений с применением детальных механизмов химической кинетики.

2 Выполнен обзор работ, посвященных оценке выбросов монооксида углерода из камер сгорания ГТД по комбинированному методу. По результатам обзора отмечены следующие основные особенности и недостатки существующих методов.

2.1 Хорошее согласование расчетных выбросов СО с экспериментом (расхождение менее 25 %) получено для камер сгорания с упрощенной конструкцией (без подвода вторичного воздуха в зону горения). Для экспериментальных моделей, близких по сложности конструкции к камерам сгорания ГТД, согласование расчета с экспериментом неудовлетворительно, либо представлено сравнение лишь на одном режиме.

2.2 Рядом авторов отмечено, что для повышения точности расчетной оценки выбросов СО необходимо учитывать неоднородность горючей смеси по составу.

2.3 Требуется формализация процесса построения реакторной модели камеры сгорания по структуре течения, полученной из трехмерного CFD моделирования. Необходимо сформировать и систематизировать процедуры построения реакторной модели.

3 Выполнено расчетное исследование влияния отдельных факторов на уровень выбросов монооксида углерода по реакторной модели малоэмиссионной камеры сгорания. Получены новые зависимости влияния на выбросы СО состава смеси ($\alpha = 1,1-3,3$), температуры воздуха на входе в камеру (300 К и 600 К),

температуры газов в пристеночной области (1120 К - 1990 К) и давления в камере сгорания (0,1-10 МПа) с учетом теплоотвода от газа к стенкам.

Упомянутое выше расчетное исследование выполнено на начальных этапах работы и не содержит мероприятия по уточнению влияния неоднородности состава горючей смеси на выбросы СО. Однако, результаты расчетов показали перспективность и целесообразность развития комбинированного метода расчета выбросов вредных веществ из камер сгорания ГТД.

ГЛАВА 3 МЕТОД РАСЧЕТА ВЫБРОСОВ МОНООКСИДА УГЛЕРОДА С ФОРМАЛИЗОВАННЫМ ВЫДЕЛЕНИЕМ ЗОН, ЛИМИТИРУЮЩИХ ЕГО ОКИСЛЕНИЕ В КАМЕРАХ СГОРАНИЯ ГТД

В рамках концепции комбинированных методов (CFD и реакторный метод), разработан метод расчета выбросов монооксида углерода с формализованным выделением зон, лимитирующих его окисление в камерах сгорания ГТД [22, 23, 2, 75].

Сформировано два критерия моделирования реакторами зон с высоким содержанием СО: критерий моделирования неравномерно распределённых низкотемпературных зон и критерий моделирования зоны пламени. Эти зоны лимитируют окисление монооксида углерода.

Низкой температуре $T < 1400$ К соответствует высокое содержание СО в продуктах сгорания метановоздушных смесей ввиду уменьшения скоростей химических реакций и приближения к границе «бедного» срыва. На основании этого, для учёта неравномерности по коэффициенту избытка воздуха и повышения точности расчётов, разработан критерий, согласно которому неравномерно распределённые в рабочем объёме «бедные» зоны объединяются в «бедные» струйки с составом смеси, соответствующим адиабатической температуре продуктов сгорания $T_{adia} = 1450 \pm 50$ К. «Бедные» струйки моделируются отдельными реакторами, именно в них оценивается количество СО, не успевшее окислиться до CO_2 . Диапазон по T_{adia} выбран с небольшим запасом для устойчивого розжига горючей смеси в реакторах «бедных» струек.

Для моделирования зоны пламени разработан критерий, согласно которому выделяется зона, в которой существенен сдвиг равновесия в сторону СО (существенна диссоциация продуктов сгорания), чему соответствует температура $T_{adia} > 1900$ К по результатам анализа характеристик пламён в исследованном диапазоне давления 0,5-10,0 МПа.

Опишем основные этапы метода с формализованным построением реакторной модели камеры сгорания.

1. Трехмерное CFD моделирование. По результатам CFD моделирования определяется поле скоростей (структура течения), распределение реагентов в камере сгорания.

2. Выбор расчетных сечений.

3. Выявление «бедных» струек в расчетных сечениях (с оценкой расхода газа и других параметров), оценка параметров оставшейся – основной струйки.

4. Оценка во фронтальном устройстве: объема зоны обратных токов; объема и расхода газа в зоне пламени; параметров «бедной» и основной струек.

5. Оценка массообмена между элементами реакторной модели по принципу сохранения баланса расходов.

6. Расчет реакторной модели камеры сгорания в специализированном программном продукте.

Разработанная по предлагаемому методу реакторная модель камеры сгорания не требует модификации стандартных математических моделей и ввода корректирующих эмпирических коэффициентов.

3.1 CFD моделирование

3.1.1 Моделирование турбулентности

В камерах сгорания ГТД режим течения газов турбулентный. Параметры турбулентности реагирующего потока (интенсивность, масштаб и др.) во многом определяют газодинамическую структуру течения, поле скоростей и распределение реагентов в рабочем объеме камеры сгорания.

В вычислительной газовой динамике (CFD) разработано немало подходов к моделированию турбулентности (RANS, LES, DES, DNS и др. [34, 58]).

В рамках предлагаемого метода расчёта выбросов CO для моделирования турбулентности применим RANS подход (Reynolds Average Navies-Stock Equation – осреднение уравнений Навье-Стокса по Рейнольдсу). Основные достоинства RANS:

- относительная простота моделей;
- устойчивость моделей;
- возможность проведения расчетов в стационарной постановке (в отличие от LES, DES и др.);
- быстрота вычисления (временные затраты расчетов LES в 100-1000 раз превышают затраты, характерные для RANS [89]);
- широкое распространение – опубликовано большое количество работ с применением RANS моделей турбулентности.

В рамках RANS подхода производится решение осредненных по времени уравнений движения. Мгновенную скорость u (и другие параметры) разделяют на осредненную $\bar{u}$ и пульсационную u' составляющие (рисунок 3.1):

$$u = \bar{u} + u' . \quad (3.1)$$

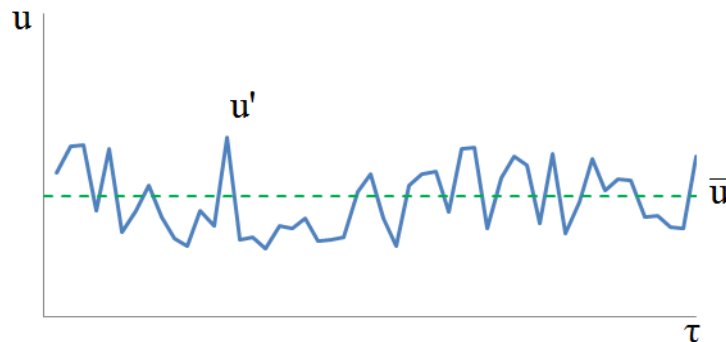


Рисунок 3.1 – Пульсационная и осредненная скорости

Покажем, как учет пульсационной составляющей скорости преобразует уравнения движения, для этого распишем дифференциальные уравнения Навье-Стокса [47]:

$$\left. \begin{aligned} \frac{du}{dt} &= X - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \Delta u + \frac{1}{3} \nu \frac{\partial}{\partial x} \operatorname{div} \vec{W} \\ \frac{dv}{dt} &= Y - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \Delta v + \frac{1}{3} \nu \frac{\partial}{\partial y} \operatorname{div} \vec{W} \\ \frac{dw}{dt} &= Z - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \Delta w + \frac{1}{3} \nu \frac{\partial}{\partial z} \operatorname{div} \vec{W} \end{aligned} \right\} \quad (3.2)$$

Здесь, $\frac{d...}{dt}$ – полная (субстанциональная) производная, X, Y, Z – массовые силы, Δ – оператор Лапласа.

Система уравнений 3.2 описывает неустановившееся пространственное движение сжимаемой вязкой жидкости. Для упрощения математических выкладок, преобразуем это уравнение для случая квазиустановившегося турбулентного движения несжимаемой ($\text{div} \vec{W} = 0$) вязкой жидкости при отсутствии массовых сил ($X=Y=Z=0$):

$$\left. \begin{aligned} \rho \left[\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} + \frac{\partial(uw)}{\partial z} \right] &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \Delta u \\ \rho \left[\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(vu)}{\partial x} + \frac{\partial(v^2)}{\partial y} + \frac{\partial(vw)}{\partial z} \right] &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \Delta v \\ \rho \left[\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial(wu)}{\partial x} + \frac{\partial(wv)}{\partial y} + \frac{\partial(w^2)}{\partial z} \right] &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \Delta w \end{aligned} \right\} \quad (3.3)$$

В системе уравнений 3.3, выразив истинные значения компонент скорости (u, v, w) через осредненные и пульсационные составляющие, а также с учетом того, что $\overline{u'v'} \neq 0, (\overline{u'})^2 \neq 0, \overline{u'} = 0, \frac{\partial \overline{u}}{\partial t} = 0$ и т.д., получим:

$$\left. \begin{aligned} \rho \left(\overline{u} \frac{\partial \overline{u}}{\partial x} + \overline{v} \frac{\partial \overline{u}}{\partial y} + \overline{w} \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \right) &= -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x} + \mu \Delta \overline{u} - \rho \left[\frac{\partial \overline{u^2}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{u'w'}}{\partial z} \right] \\ \rho \left(\overline{u} \frac{\partial \overline{v}}{\partial x} + \overline{v} \frac{\partial \overline{v}}{\partial y} + \overline{w} \frac{\partial \overline{v}}{\partial z} \right) &= -\frac{\partial \overline{p}}{\partial y} + \mu \Delta \overline{v} - \rho \left[\frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'^2}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v'w'}}{\partial z} \right] \\ \rho \left(\overline{u} \frac{\partial \overline{w}}{\partial x} + \overline{v} \frac{\partial \overline{w}}{\partial y} + \overline{w} \frac{\partial \overline{w}}{\partial z} \right) &= -\frac{\partial \overline{p}}{\partial z} + \mu \Delta \overline{w} - \rho \left[\frac{\partial \overline{u'w'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'w'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w'^2}}{\partial z} \right] \end{aligned} \right\} \quad (3.4)$$

Выражение 3.4 содержит дополнительные члены, обусловленные турбулентными пульсациями. Это так называемые «кажущиеся турбулентные напряжения» - $\rho \overline{u'^2}, \rho \overline{v'^2}, \rho \overline{w'^2}, \rho \overline{u'v'}, \rho \overline{u'w'}, \rho \overline{v'w'}$. Их влияние проявляется в условном увеличении вязкости осредненного движения по сравнению с

молекулярной вязкостью [47]. Задача моделирования турбулентности заключается в количественной оценке кажущихся турбулентных напряжений.

RANS модели турбулентности можно разделить на два крупных направления: модели турбулентной вязкости и модели переноса напряжений Рейнольдса (кажущихся турбулентных напряжений).

В моделях турбулентной вязкости кажущиеся турбулентные напряжения определяют через выражение вида [47]:

$$\tau_T = \mu_T \frac{d\bar{u}}{dy}, \quad (3.5)$$

где μ_T - турбулентная (вихревая) вязкость;

$\frac{d\bar{u}}{dy}$ - градиент осредненной скорости.

У каждой модели турбулентности свои выражения для нахождения турбулентной вязкости. Например, для популярной модели k-ε:

$$\mu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (3.6)$$

Здесь C_μ - эмпирическая константа, k – кинетическая энергия, ε – диссипация кинетической энергии.

При применении модели k-ε необходимо решить уравнения переноса соответственно для k и ε (черта над осредненными скоростями опущена) [34]:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \cdot \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \tau_{i,j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \varepsilon, \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} + C_{\varepsilon 1} \cdot \tau_{i,j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k}, \quad (3.8)$$

здесь σ_k , σ_ε , $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$ - полуэмпирические константы.

В модели турбулентности k-ω турбулентная вязкость рассчитывается через выражение:

$$\mu_T = \alpha^* \frac{k}{\omega}, \quad (3.9)$$

здесь α^* - демпфирующий коэффициент.

Уравнения переноса для k и ω :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \cdot \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - Y_k + S_k, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \omega u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \cdot \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + G_\omega - Y_\omega + S_\omega, \quad (3.11)$$

здесь G_k и G_ω - генерация турбулентной кинетической энергии и удельной скорости диссипации, Y_k и Y_ω - диссипация k и ω , S_k и S_ω - источниковые члены, σ_k и σ_ω - турбулентные числа Прандтля для k и ω .

k - ϵ зарекомендовала себя успешной в моделировании основного потока (вдали от стенок), в то время как модель k - ω разрабатывалась большей частью для моделирования пристеночных течений. В настоящей работе применялась модель SST, которая объединяет достоинства k - ϵ и k - ω .

Модели переноса напряжений Рейнольдса, в отличие от моделей турбулентной вязкости, позволяют учесть анизотропию турбулентности. Однако они сложнее и «тяжелее», т.к. предполагают решение уравнений переноса рейнольдсовых напряжений, и нашли меньшее применение в CFD.

3.1.2 Моделирование горения

Модель горения количественно определяет влияние турбулентности на процессы горения.

Основная задача моделей горения – расчет скорости выгорания топлива в турбулентном потоке (с учетом влияния турбулентности). Решение этой задачи осложняется экспоненциальной зависимостью скорости химических реакций от температуры. При такой нелинейной зависимости нельзя использовать осредненную по времени температуру горючей смеси, необходимо учитывать пульсационную составляющую температуры в турбулентном потоке.

Игнорирование пульсаций может привести к существенным ошибкам при расчете уровня выбросов вредных веществ [25, 89].

В настоящей работе использовалась модель горения семейства EDM/FRC (Eddy Dissipation/Finite Rate Chemistry Model [87]). В этой модели используются два выражения для расчета скорости горения.

Первое выражение:

$$R_{EDM} = A_{EDM} \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left\{ \bar{C}_F; \frac{\bar{C}_{Ox}}{\nu}; B_{EDM} \frac{\bar{C}_{Pr}}{1 + \nu} \right\}, \quad (3.12)$$

где A_{EDM}, B_{EDM} – коэффициенты;

ρ – плотность;

$\frac{\varepsilon}{k}$ – скорость смешения в турбулентном потоке;

$\bar{C}_F, \bar{C}_{Ox}, \bar{C}_{Pr}$ – средние концентрации топлива (F), окислителя (Ox) и продуктов сгорания (Pr) соответственно;

ν – стехиометрический коэффициент в реакции вида: $F + \nu \cdot Ox \rightarrow (1 + \nu) Pr$.

Согласно первому выражению скорость горения лимитируется процессами смешения $\left(R_{EDM} \propto \frac{\varepsilon}{k} \right)$.

Второе выражение – уравнение Аррениуса:

$$R_{Arr} = AT^\beta \exp(-E / RT) \cdot [F]^a [Ox]^b, \quad (3.13)$$

здесь A – предэкспоненциальный фактор, E – энергия активации.

За результирующую скорость горения принимают минимальную из R_{EDM} и R_{Arr} [58, 59].

Модель горения EDM/FRC не предназначена для детальной оценки выбросов вредных веществ из камер сгорания ГТД ввиду того, что в ней применяются глобальные механизмы химической кинетики. Достоинство этой модели – быстрота вычислений с оценкой распределения температур и основных компонентов горючей смеси в расчетной области.

Была выполнена экспресс-оценка вычислительной эффективности моделей горения семейства EDM/FRC. Для этого проведено сравнение с «тяжелой» моделью горения EDC (Eddy Dissipation Concept), предназначенной для оценки выбросов вредных веществ с применением детальной химической кинетики. Результаты сравнительных расчетов камеры сгорания, работающей на природном газе, с упрощенной конструкцией показали, что модели горения типа EDM/FRC требуют в 20 раз меньше вычислительного времени по сравнению с моделью EDC при прочих равных условиях.

3.1.3 Моделирование лучистого теплообмена

Наиболее подробной характеристикой поля излучения является распределение интенсивности излучения I в исследуемой области. Величина I определяет поток энергии излучения, пересекающий единичную площадку и распространяющийся в направлении нормали к ее поверхности внутри элементарного телесного угла [30].

Изменение интенсивности излучения при прохождении теплового луча расстояния ds в газе с температурой T и коэффициентом поглощения K описывается следующим образом [94]:

$$\frac{dI}{ds} = -KI + \frac{K\sigma T^4}{\pi}, \quad (3.14)$$

где σ – константа Стефана-Больцмана.

В настоящей работе, для моделирования излучения высокотемпературных продуктов сгорания применялась модель Discrete Transfer (DT) [58, 94]. В этой модели непрерывное полусферическое излучение с поверхностей заменяется на дискретное с заданным количеством телесных углов.

В модели оценивается изменение интенсивности излучения по мере движения лучей в исследуемой области. Пусть с поверхности 1 излучение падает на поверхность 2 (рисунок 3.2). При этом тепловой луч пересекает пространство

дискретно разбитое на ячейки. В общем случае газ в каждой ячейке имеет свою температуру и коэффициент поглощения. Проинтегрировав выражение (3.14), можно получить выражение для расчета изменения интенсивности излучения по мере движения теплового луча в пространстве:

$$I_{n+1} = \frac{\sigma T_i^4}{\pi} (1 - e^{-Ks}) + I_n e^{-Ks}. \quad (3.15)$$

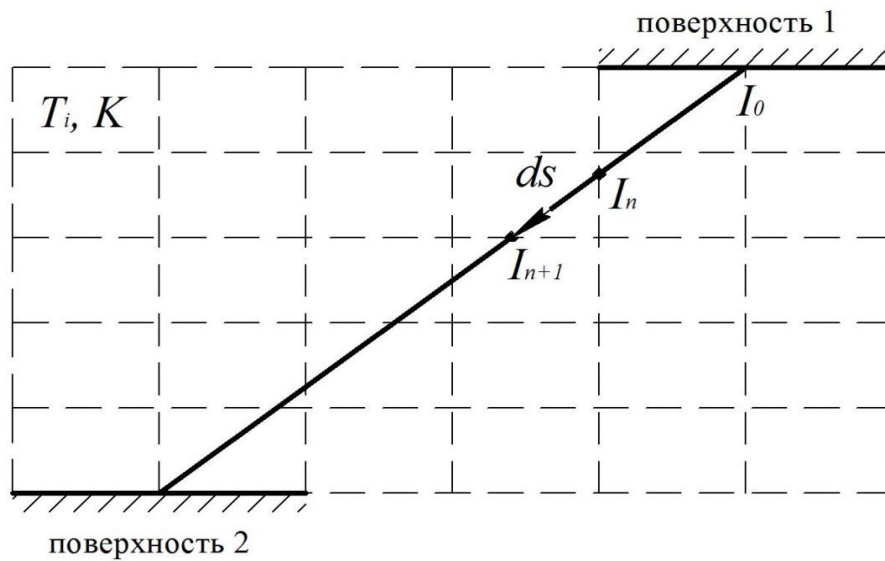


Рисунок 3.2 – Изменение интенсивности излучения

По известному изменению интенсивности излучения в ячейках «газодинамической» сетки рассчитываются источники/стоки энергии, вызванные тепловым излучением.

Отдельной задачей, при моделировании лучистого теплообмена, является оценка радиационных свойств продуктов сгорания. Известно, что в камерах сгорания ГТД основной вклад в теплообмен излучением вносят сажа, следующие газы – H_2O , CO_2 , CO и несгоревшие углеводороды [30]. При этом газы излучают и поглощают энергию не во всем спектре (по длине волны), а в дискретных полосах спектра. Для оценки радиационных свойств продуктов сгорания рекомендуется использовать модель Взвешенной Суммы Серых Газов (Weighted Sum of Gray Gases – WSGG [58]).

В модели WSGG реализуется приближение спектрального излучения газов к излучению отдельных серых газов [49]. Степень черноты продуктов сгорания определяется по формуле [58]:

$$\varepsilon_{\Gamma} = \sum_{i=1}^4 \left(b_{1i} + 10^{-5} b_{2i} T_{\Gamma} \right) \left[1 - e^{-\left(K_i (p_{H_2O} + p_{CO_2} + p_{CO}) + K_{HCi} \cdot p_{HC} \right) L} \right]. \quad (3.16)$$

Здесь, b_{1i} , b_{2i} , K_i , K_{HCi} - коэффициенты [58].

$p_{H_2O} \dots$ - парциальные давления.

T_{Γ} - температура газа.

L - длина пути луча.

Выполним небольшое расчетное исследование с применением моделей DT и WSGG. Цель этого – сравнить результаты трехмерного моделирования с расчетом теплообмена по эмпирическим зависимостям (с «ручным» расчетом). Для этого рассмотрим задачу, условия которой приведены на рисунке 3.3.

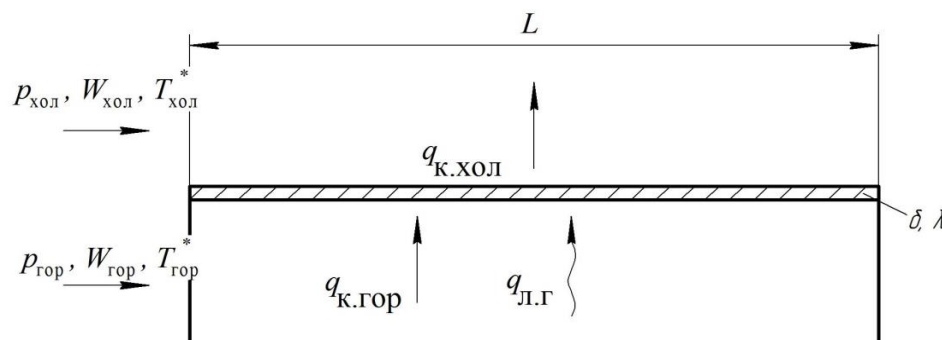


Рисунок 3.3 – Тепловой баланс стенки трубы

В трубе с внутренним диаметром 150 мм и длиной 500 мм протекают продукты сгорания с параметрами: $g(CO_2) = 0,117$, $g(H_2O) = 0,097$, $g(O_2) = 0,108$, $g(N_2) = 0,678$, $W_{гор} = 30$ м/с, $p_{гор} = 0,5$ МПа, $T_{гор}^* = \text{var} (873, 1073, 1273, 1473, 1773 \text{ и } 2073 \text{ K})$. Снаружи труба охлаждается воздухом с параметрами: $W_{хол} = 30$ м/с, $p_{хол} = 0,5$ МПа, температура задавалась из условия постоянства отношения $T_{хол}^* / T_{гор}^* = 0,41$. Толщина стенки трубы $\delta = 1,5$ мм. Материал трубы – металл с теплопроводностью $\lambda = 65$ Вт/(м²К). Степень черноты стенки – $\varepsilon_w = 0,8$.

Уравнение теплового баланса для стенки трубы запишем следующим образом (без учета излучения в окружающее пространство):

$$q_{к.гор} + q_{л.г} = q_{к.хол}. \quad (3.17)$$

Здесь, $q_{к.гор}$ - конвективный тепловой поток от продуктов сгорания к стенке, $q_{л.г}$ - лучистый тепловой поток от продуктов сгорания к стенке, $q_{к.хол}$ - конвективный тепловой поток от стенки к охлаждающему воздуху.

Удельные тепловые потоки можно расписать следующим образом:

$$\begin{cases} q_{к.хол} = \alpha_{хол}(T_{w,x} - T_{хол}^*) \\ q = \frac{\lambda}{\delta}(T_{w,г} - T_{w,x}) \\ q_{к.гор} = (\alpha_{гор} + \alpha_{луч})(T_{гор}^* - T_{w,г}) \end{cases} \quad (3.18)$$

Здесь, $\alpha_{хол}$ - коэффициент теплоотдачи со стороны воздуха, $\alpha_{гор}$ - коэффициент теплоотдачи со стороны продуктов сгорания, $\alpha_{луч}$ - коэффициент теплоотдачи излучением [30].

Коэффициенты теплоотдачи со стороны холодного и горячего потоков определялись по критериальному уравнению обдува пластины $Nu = f(Re, Pr)$ [30]. (При расчете теплового состояния жаровых труб и корпусов камер сгорания часто используют закономерности теплообмена при обтекании плоской пластины, такое упрощение справедливо, т.к. ввиду малых длин каналов пограничные слои не успевают сомкнуться [9, 12, 40 и др.]).

Степень черноты продуктов сгорания определялась по эмпирической формуле [26]:

$$\varepsilon_r = 1 - \exp\left[-290p(\chi \cdot L)^{0,5}T_r^{-1,5}\right]. \quad (3.19)$$

Здесь, χ – массовое отношение топлива/воздух.

Систему уравнений (3.18) можно решить методом последовательного подбора температуры стенки.

CFD моделирование выполнено в ПК ANSYS CFX v 16.1. Количество элементов в расчетной сетке – порядка 10,5 млн ($Y_{plus} = 3-19$). Модель турбулентности – SST. Модель лучистого теплообмена – DT (настройки приняты по умолчанию). Спектральная модель – WSGG. На граничных поверхностях модели (вход и выход газового и воздушного тракта) задано условие излучения абсолютного черного тела с температурой, соответствующей температуре стенки трубы, рассчитанной «ручным» методом – такой подход позволяет минимизировать влияние излучения граничных поверхностей на температуру стенки (программный пакет требует задания условий излучения на граничных поверхностях).

Дополнительно выполнены расчеты при тех же условиях обдува, но без учета теплового излучения.

Результаты расчетов приведены на рисунке 3.4.

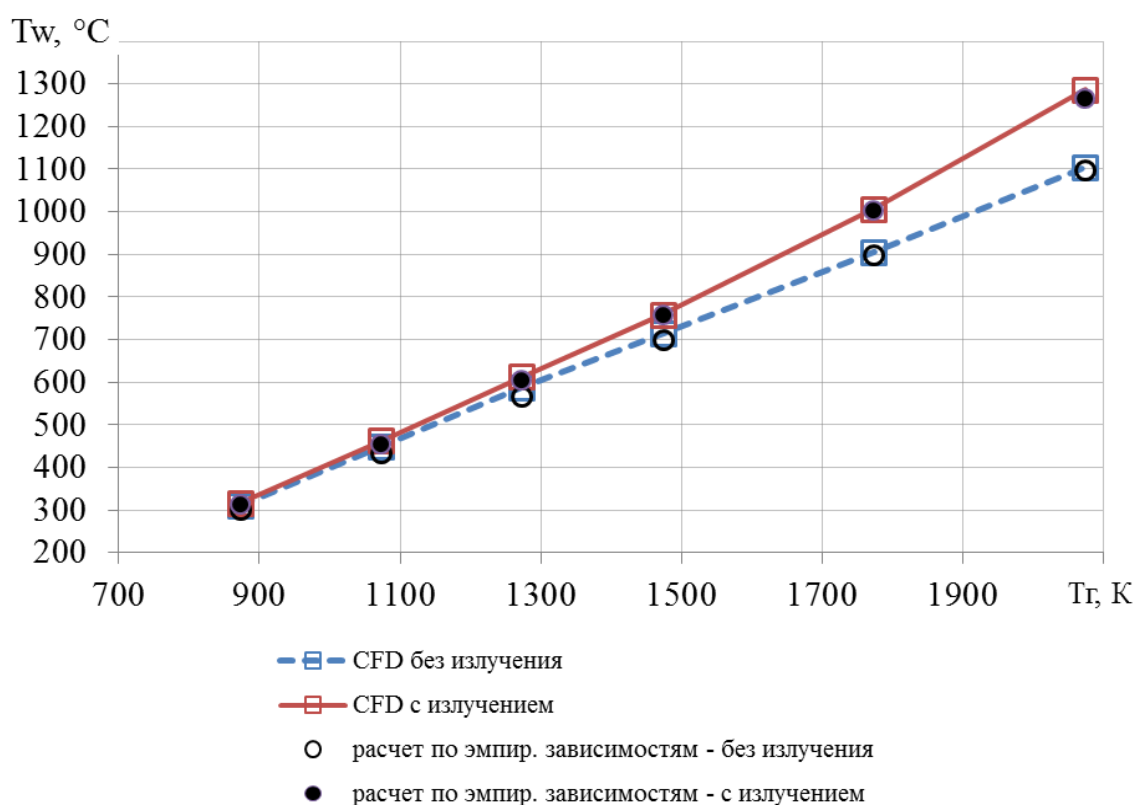


Рисунок 3.4 – Результаты расчета температуры стенки

На графике T_w – осредненная по длине температура стенки.

Из рисунка видно хорошее согласование результатов CFD моделирования и расчетов по эмпирическим зависимостям. При учете теплового излучения газов, различие между CFD и «ручным» расчетом не превысило 1,7 %. Это косвенно свидетельствует о надежности моделей DT и WSGG.

3.2 Построение реакторной модели камеры сгорания

3.2.1 Расчет равновесного состояния продуктов сгорания

В реакторной модели камеры сгорания отдельно выделяются «бедные» струйки и зона пламени. Для выявления их по результатам CFD моделирования необходимо предварительно выполнить расчет равновесного состояния продуктов сгорания.

Для примера рассмотрим метановоздушную смесь с начальной температурой 460 К и давлением 0,5 МПа. Для данной смеси, в таблице 3.1, приведена зависимость адиабатической температуры продуктов сгорания и количества азота от коэффициента избытка воздуха. В таблице приведены объемные доли азота для исходной смеси (до горения), т.к. предполагается применение в CFD моделировании глобальных механизмов химической кинетики, в которых азот не участвует в реакциях горения.

Таблица 3.1 – Расчет равновесного состояния продуктов сгорания (метан-воздух, $T_{исх} = 460$ К, $p = 0,5$ МПа)

α	$r(N_2)$	T_{adia}, K
0,50	0,653	1677
0,60	0,672	1898
0,70	0,687	2071
0,80	0,698	2211
0,90	0,708	2319
1,00	0,715	2342
1,10	0,721	2260
1,20	0,726	2160
1,30	0,731	2065

Продолжение таблицы 3.1

α	$r(N_2)$	T_{adia}, K
1,40	0,735	1979
1,50	0,738	1902
1,60	0,741	1831
1,70	0,744	1766
1,80	0,746	1709
1,90	0,749	1654
2,00	0,751	1606
2,10	0,752	1560
2,20	0,754	1520
2,30	0,755	1481
2,40	0,757	1445
2,50	0,758	1411
2,70	0,760	1349

Ниже будет отмечено, что под «зоной пламени» в настоящей работе подразумевается горючая смесь с адиабатической температурой продуктов сгорания выше 1900 К. Соответственно, по таблице 3.1 можно выявить диапазон $r(N_2)$, который будет соответствовать требуемой температуре (для данного примера $r(N_2)$ от 0,672 до 0,738). Значения диапазона $r(N_2)$ в дальнейшем используются при выявлении зоны пламени в результате CFD моделирования.

По таблице 3.1 выявляется содержание азота, которое соответствуют температуре «бедной» струйки – $T_{adia} \approx 1450$ К (для данного примера $r(N_2) = 0,757$ при $T = 1445$ К). Это значение $r(N_2)_{\text{ЦЕЛЕВОЕ}}$ в дальнейшем используется для выявления «бедных» струек в расчетных сечениях.

3.2.2 Выбор расчетных сечений

Расчетные сечения выбираются, исходя из конструктивных особенностей камеры сгорания – в сечениях начала секций и газосборника жаровой трубы, подвода основного воздуха (и др.) и расчетной трехмерной структуры течения. Пример разбиения жаровой трубы на расчетные сечения приведен на рисунке 3.5. В последующем, реакторная модель камеры сгорания строится на базе обработки параметров CFD результата в этих сечениях.

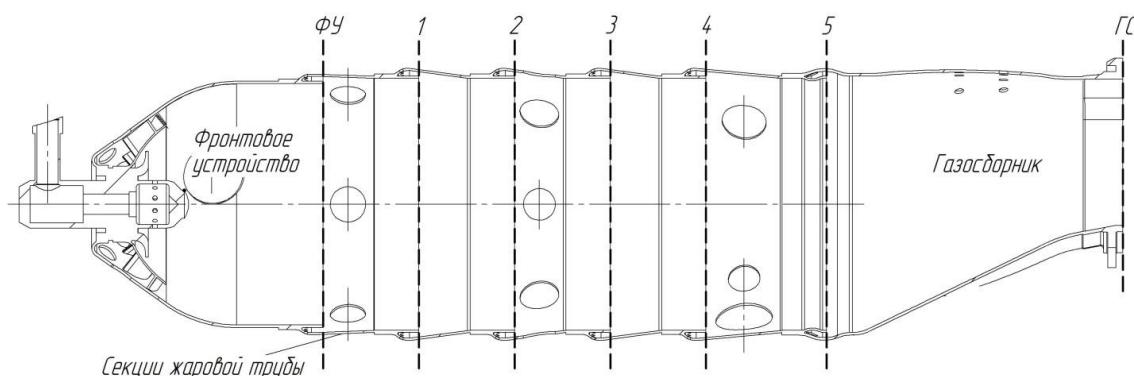


Рисунок 3.5 – Пример разбиения жаровой трубы на расчетные сечения

Сечение «ФУ» (за фронтовым устройством) определяется из расчетного расположения зоны обратных токов (ЗОТ). Рекомендуется располагать сечение за точкой перегиба ЗОТ (точка границы ЗОТ с максимальной радиальной координатой).

Сечения «1»-«5», в данном примере, определяют границы секций жаровой трубы. В общем случае рекомендуемое расстояние между сечениями – не более 50-70 мм.

В зоне газосборника допускается увеличение расстояния до 200 мм (между сечениями «5» - «ГС»).

3.2.3 Выявление «бедных» струек топливовоздушной смеси

В выбранных расчетных сечениях поток газов неоднороден по составу (в особенности во фронтовом устройстве и в следах подвода воздуха). Пример расчетной неоднородности горючей смеси приведен на рисунке 3.6.

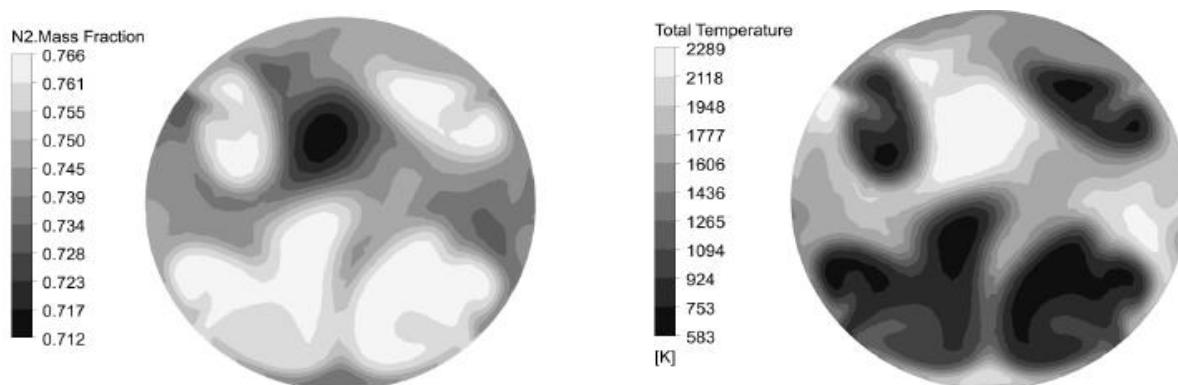


Рисунок 3.6 – Распределение массовой доли азота и температуры в жаровой трубе трубчато-кольцевой камеры сгорания

Для учета неоднородности состава горючей смеси предлагается объединять неравномерно распределенные «бедные» зоны в одну «бедную» струйку, состав которой соответствует адиабатической температуре продуктов сгорания $T_{adia} = 1450 \pm 50$ К (струйка – газ, движущийся внутри трубки тока [8]). При этой температуре скорость окисления СО мала, однако нет полного «замораживания» пламени [21, 26]. Состав горючей смеси (α) при заданной T_{adia} определяется по давлению и температуре исходной ТВС.

«Бедные» струйки выявляются по распределению объемной доли содержания азота $r(N_2)$ в расчетных сечениях. При применении в CFD глобальных механизмов химической кинетики азот не участвует в химических реакциях и, поэтому, его количество однозначно определяет состав горючей смеси.

Отдельно отметим, что при применении детальных механизмов химической кинетики, по азоту также можно определять состав смеси. Однако в чрезмерно «богатых» смесях содержание азота N_2 после сжигания топлива изменяется. Это можно объяснить образованием азотосодержащих соединений типа NH_3 , HCN , $HNCO$ и др. в условиях дефицита кислорода. Из рисунка 3.7 видно, что для метановоздушной смеси, начиная с $\alpha < 0,7$, расхождение по $r(N_2)$ становится более 5 %. Т.е. в этом случае, состав смеси оценивается не по содержанию двухатомарного N_2 , а по балансу элемента N.

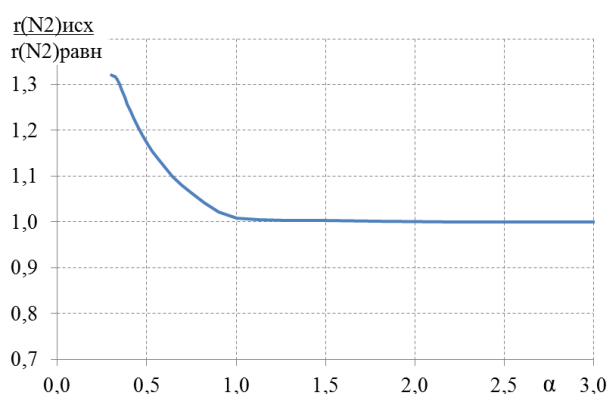


Рисунок 3.7 – Отношение объемной доли азота в исходной смеси и равновесных продуктах сгорания

(метан-воздух, детальный механизм GRI-Mech 3.0, $T_{исх} = 470$ К, $p = 0,5$ МПа)

Процедура выявления «бедной» струйки в расчетном сечении следующая. Из результата CFD моделирования из расчётных ячеек, пересекающих расчётное сечение, экспортируется массив объёмных долей азота и массовых расходов. Далее этот массив сортирует по убыванию $r(N_2)$ – от «бедных» струек к более «богатым». Затем, в отсортированном массиве «бедные» струйки объединяются в одну с составом соответствующим $Tadia \approx 1450$ К. При этом состав определяется содержанием $r(N_2)$:

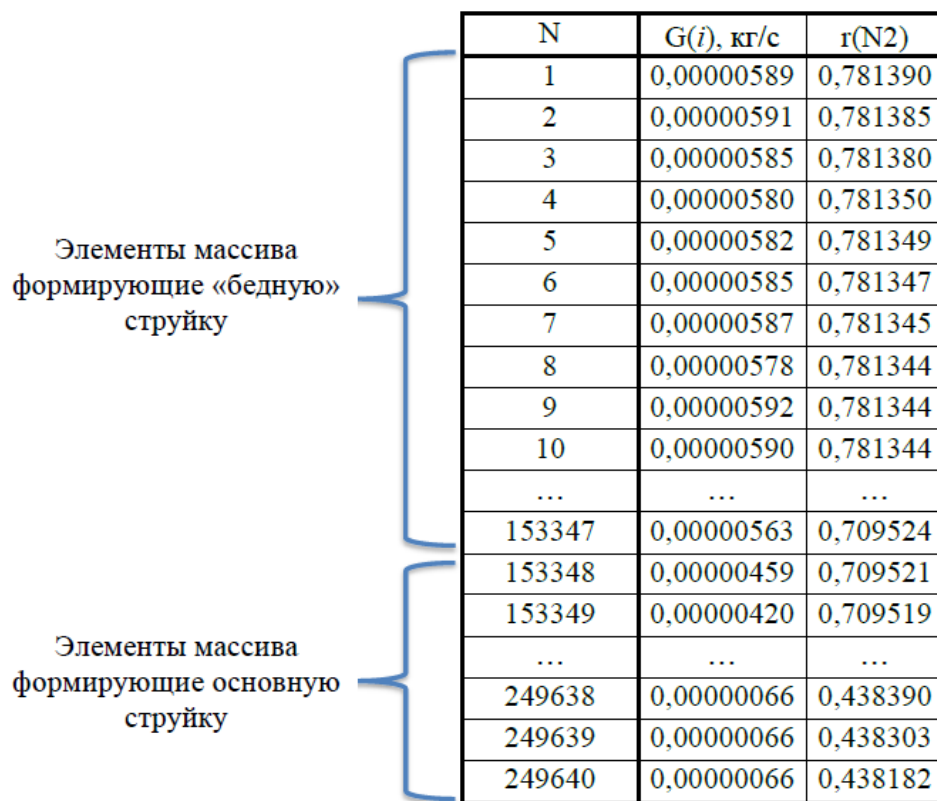
$$r(N_2)_{ЦЕЛЕВОЕ} = \frac{G_1 \cdot r(N_2)_1 + G_2 \cdot r(N_2)_2 + \dots + G_n \cdot r(N_2)_n}{G_1 + G_2 + \dots + G_n}. \quad (3.20)$$

Расход объединенной «бедной» струйки будет равен:

$$G_{БД} = G_1 + G_2 + \dots + G_n. \quad (3.21)$$

Далее рассчитывается расход и состав оставшейся (основной) струйки ТВС в данном расчетном сечении.

Пример массива, отсортированного по убыванию $r(N_2)$, приведен на рисунке 3.8.



N	$G(i)$, кг/с	$r(N_2)$
1	0,00000589	0,781390
2	0,00000591	0,781385
3	0,00000585	0,781380
4	0,00000580	0,781350
5	0,00000582	0,781349
6	0,00000585	0,781347
7	0,00000587	0,781345
8	0,00000578	0,781344
9	0,00000592	0,781344
10	0,00000590	0,781344
...	...	...
153347	0,00000563	0,709524
153348	0,00000459	0,709521
153349	0,00000420	0,709519
...	...	...
249638	0,00000066	0,438390
249639	0,00000066	0,438303
249640	0,00000066	0,438182

Рисунок 3.8 – Пример массива отсортированного по убыванию $r(N_2)$

Объемы «бедной» и основной струек определяются из соотношения их массовых расходов.

«Бедные» струйки моделируются в реакторной модели камеры сгорания отдельными реакторами. Для корректной оценки количества СО в объеме низкотемпературной «бедной» струйки требуется учет детальной химической кинетики [11].

3.2.4 Моделирование зоны пламени

В работе ЦИАМ [45] отмечено, что одна из проблем расчета камер сгорания по реакторной модели – моделирование зоны пламени.

В настоящей работе, под зоной пламени принимается горючая смесь с адиабатической температурой продуктов сгорания более 1900 К. При такой температуре уже существенна диссоциация углекислого газа в монооксид углерода [19]. Расположение зоны пламени во фронтовом устройстве, ее объем и расход газа определяются с помощью изообъема по заданному диапазону объемной доли азота (в Post-процессоре CFD программы конструируется параметр, значение которого будет иметь одну величину для заданного диапазона по $r(N_2)$). Так, например, при температуре исходной метановоздушной смеси 470 К температуре пламени $T > 1900$ К соответствует диапазон $r(N_2)$ от 0,738 до 0,715.

Пример выявленной зоны пламени во фронтовом устройстве приведен на рисунке 3.9. Зона пламени ограничена сечением начала первой секции жаровой трубы.

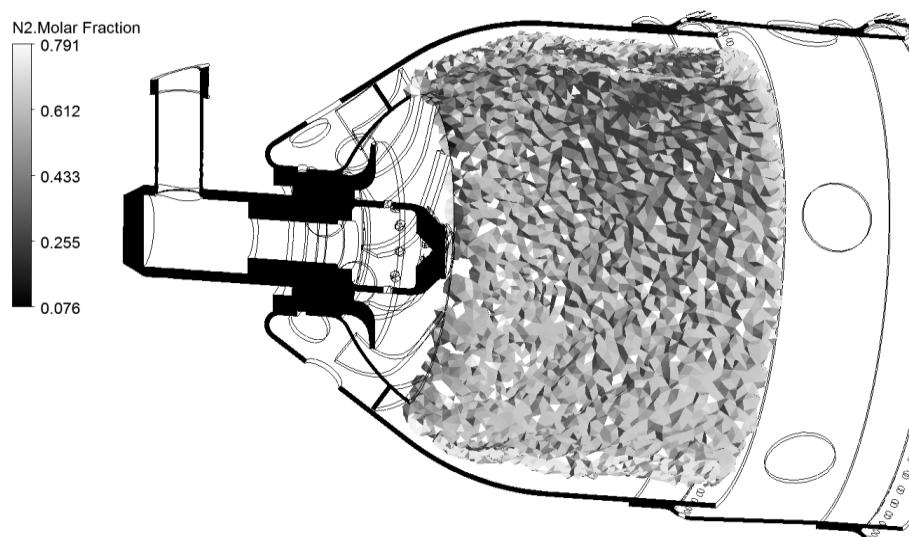


Рисунок 3.9 – Зона пламени во фронтном устройстве, выявленная по результатам CFD моделирования

Выявленный изообъем позволяет оценить массовый расход горючей смеси в зоне пламени.

В настоящей работе применен следующий способ оценки расхода смеси в зоне пламени.

1. Оценивается длина зоны пламени L – от начала фронтного устройства до первого расчетного сечения (в случае примера рисунка 3.9 – до начала первой секции жаровой трубы).
2. Оценивается объем зоны пламени V .
3. Оценивается условная площадь проходного сечения зоны пламени $F = V/L$.
4. Оценивается осредненная по объему осевая скорость u и плотность ρ зоны пламени.
5. Оценивается массовый расход зоны пламени $G = \rho \cdot u \cdot F$.

3.2.5 Моделирование фронтного устройства

Отдельно рассмотрим особенности построения реакторной схемы в первом характерном сечении в следе за фронтным устройством. Это наиболее сложная

зона для моделирования, т.к. в общем случае здесь можно выделить: зону обратных токов, зону пламени, основную и «бедную» струйки газового потока, а также остатки «чистого» воздуха (рисунок 3.10).

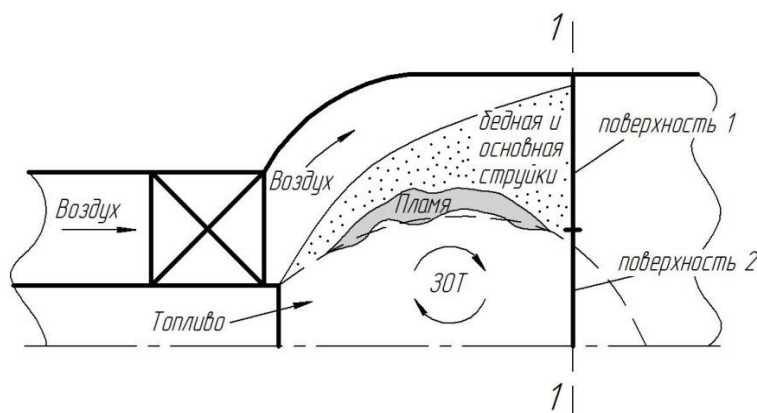


Рисунок 3.10 – Структура течения фронтального устройства

Отметим, что сечение 1-1 выбрано таким образом, что пересекает зону обратных токов (рисунок 3.10). В постпроцессоре CFD программы в этом сечении строятся две непересекающиеся поверхности. Первая поверхность – кольцевая над зоной обратных токов (ЗОТ). В ней протекают основная, «бедная» струйки и остатки «чистого» воздуха. Вторая поверхность непосредственно пересекает ЗОТ. Ее границы несколько превышают границы ЗОТ, так чтобы среднемассовый расход газа был направлен в сторону выхода камеры сгорания. Такой подход позволяет существенно упростить моделирование ЗОТ – ЗОТ моделируется одним реактором идеального смешения с потоком малого расхода (без организации рециркуляции между реакторами).

Пример кольцевой поверхности над ЗОТ приведен на рисунке 3.11.

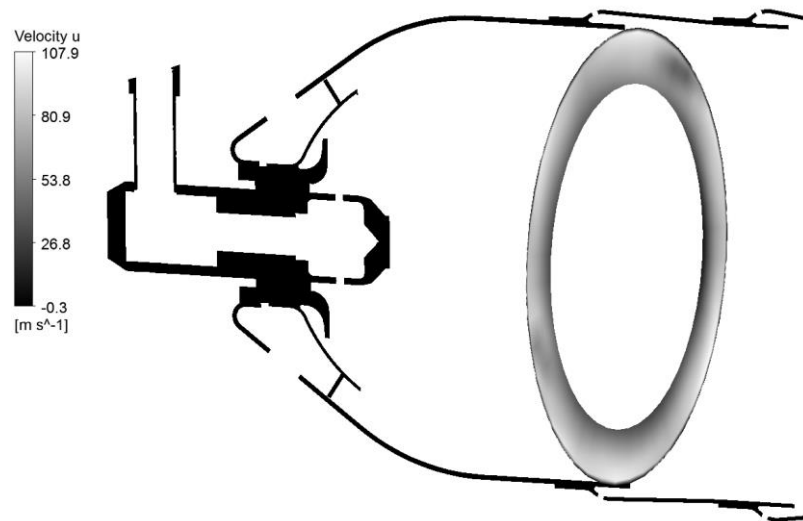


Рисунок 3.11 – Кольцевая поверхность над ЗОТ

Объем ЗОТ от начала фронтального устройства до сечения 1-1 определяется по результатам CFD моделирования. Один из способов определения объема ЗОТ – по распределению осевой составляющей скорости (рисунок 3.12).

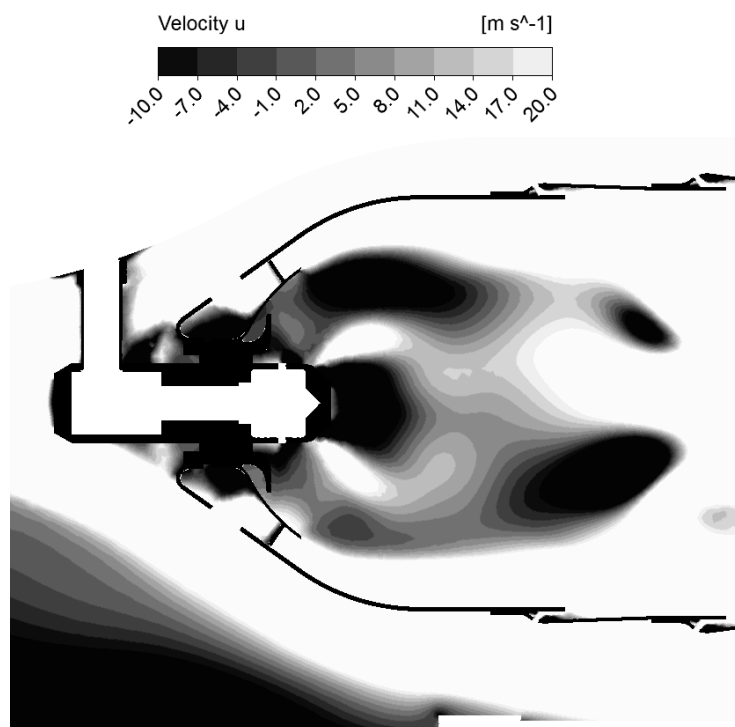


Рисунок 3.12 – Пример распределения осевой составляющей скорости

Рассмотрим поэтапно процедуру «разбиения» фронтального устройства на реакторы.

1. Выбираем сечение 0-0 так, чтобы оно пересекало ЗОТ (рисунок 3.10).
2. В зоне от начала ФУ до сечения 0-0 выявляем зону пламени, оцениваем ее объем и расход горючей смеси.

В дальнейшем зона пламени будет разделена на три части ПЛ.I, ПЛ.II и ПЛ.III, продукты сгорания которых участвуют в формировании «бедной» струйки, основной струйки и ЗОТ соответственно.

3. В зоне от начала ФУ до сечения 0-0 оцениваем объем ЗОТ.

4. В Post-процессоре CFD программы в сечении 0-0 строим две непересекающиеся поверхности (рисунок 3.10):

- первая – кольцевая над ЗОТ (рекомендуется, чтобы в поверхности 1 отсутствовали зоны с отрицательным значением осевой составляющей скорости);
- вторая – пересекает ЗОТ (ее границы несколько превышают границы ЗОТ, так чтобы среднемассовый расход газа был направлен в сторону выхода камеры сгорания).

5. В кольцевой поверхности 1 оцениваем расход «бедной» струйки $G_{БД.0}$.

6. Определяем расход продуктов сгорания (газа) из зоны пламени, которые смешиваются с воздухом и формируют «бедную» струйку (рисунок 3.13). Соотношение количества газа и воздуха определяем из баланса $r(N_2)$:

$$r(N_2)_{БД.0} = \frac{G_{газ} \cdot r(N_2)_{газ} + G_{возд} \cdot r(N_2)_{возд}}{G_{газ} + G_{возд}}, \quad (3.22)$$

где $G_{газ} + G_{возд} = G_{БД.0}$.

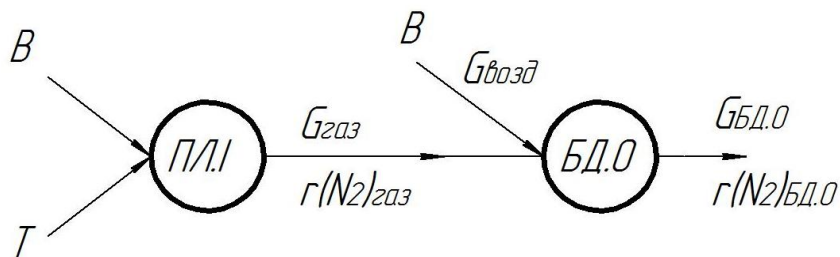


Рисунок 3.13 – Формирование «бедной» струйки во фронтной устройстве

$r(N_2)$ пламени (газа) определяется осреднением по объему зоны пламени в Post-процессоре CFD программы.

$$R(N_2)_{возд} = 0,79.$$

Содержание азота $r(N_2)_{БД.0}$ и расход $G_{БД.0}$ «бедной» струйки известны (см. раздел 3.2.3).

По известному составу и расходу горючей смеси зоны пламени (часть ПЛ.І) определяем количество топлива и воздуха, из которых она формируется.

Оставшееся количество газа зоны пламени формирует основную струйку (ОСН.0) и ЗОТ (рисунок 3.14). Принимаем допущение, что количество газа из зоны пламени распределяется пропорционально массовым расходам основной струйки и ЗОТ. (Расход газа через ЗОТ соответствует расходу через поверхность 2, $G_{\text{ОСН.0}} = G_{0.0} - G_{\text{ЗОТ}} - G_{\text{БД.0}}$)

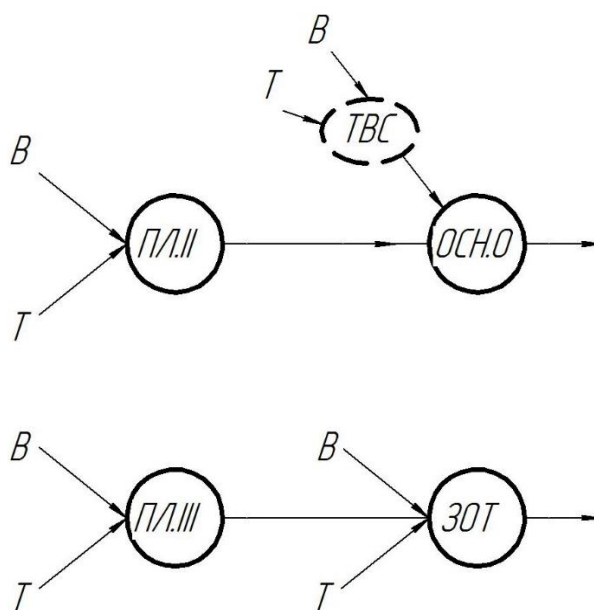


Рисунок 3.14 – Формирование основной струйки и ЗОТ

Основная струйка ОСН.0 формируется:

- продуктами сгорания зоны пламени (часть зоны пламени ПЛ.ІІ);
- воздухом и топливом (условно объединены в поток ТВС – см. рисунок 3.14).

Количество воздуха и топлива (ТВС), расходуемых на формирование ОСН.0, определяется через баланс массовых расходов:

$$G_{\text{ТВС}} = G_{\text{ОСН.0}} - G_{\text{газ.ПЛ.ІІ}}. \quad (3.23)$$

Объемная доля азота ТВС определяется по выражению:

$$r(N_2)_{\text{ТВС}} = \frac{G_{\text{ОСН.0}} \cdot r(N_2)_{\text{ОСН.0}} - G_{\text{газ.ПЛ.ІІ}} \cdot r(N_2)_{\text{газ.ПЛ.ІІ}}}{G_{\text{ТВС}}}. \quad (3.24)$$

Количество продуктов сгорания зоны пламени, воздуха и топлива, формирующих ЗОТ, определяется из баланса расходов (в ЗОТ поступают «остатки» воздуха и топлива).

Итоговая схема «разбиения» фронтального устройства на реакторы приведена на рисунке 3.15.

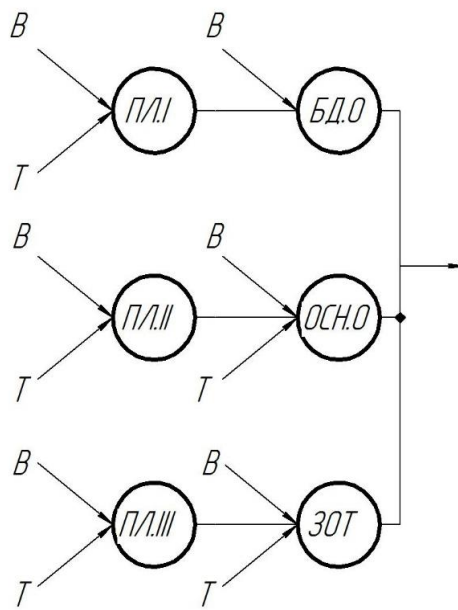


Рисунок 3.15 – Схема «разбиения» фронтального устройства на реакторы

Объемы реакторов определяются из соотношения их массовых расходов (кроме объема ЗОТ и зоны пламени – они определяются обработкой результатов CFD моделирования).

3.2.6 Моделирование смешения и массообмена между реакторами

Процессы смешения во многом определяют рабочий процесс камеры сгорания. Во фронтальном устройстве, перед розжигом, топливо смешивается с воздухом. Далее, по длине жаровой трубы, продукты сгорания смешиваются с вторичным воздухом.

Рассмотрим реакторную схему камеры сгорания, приведенную на рисунке 3.16, в части моделирования смешения потоков в секциях 1 и 2.

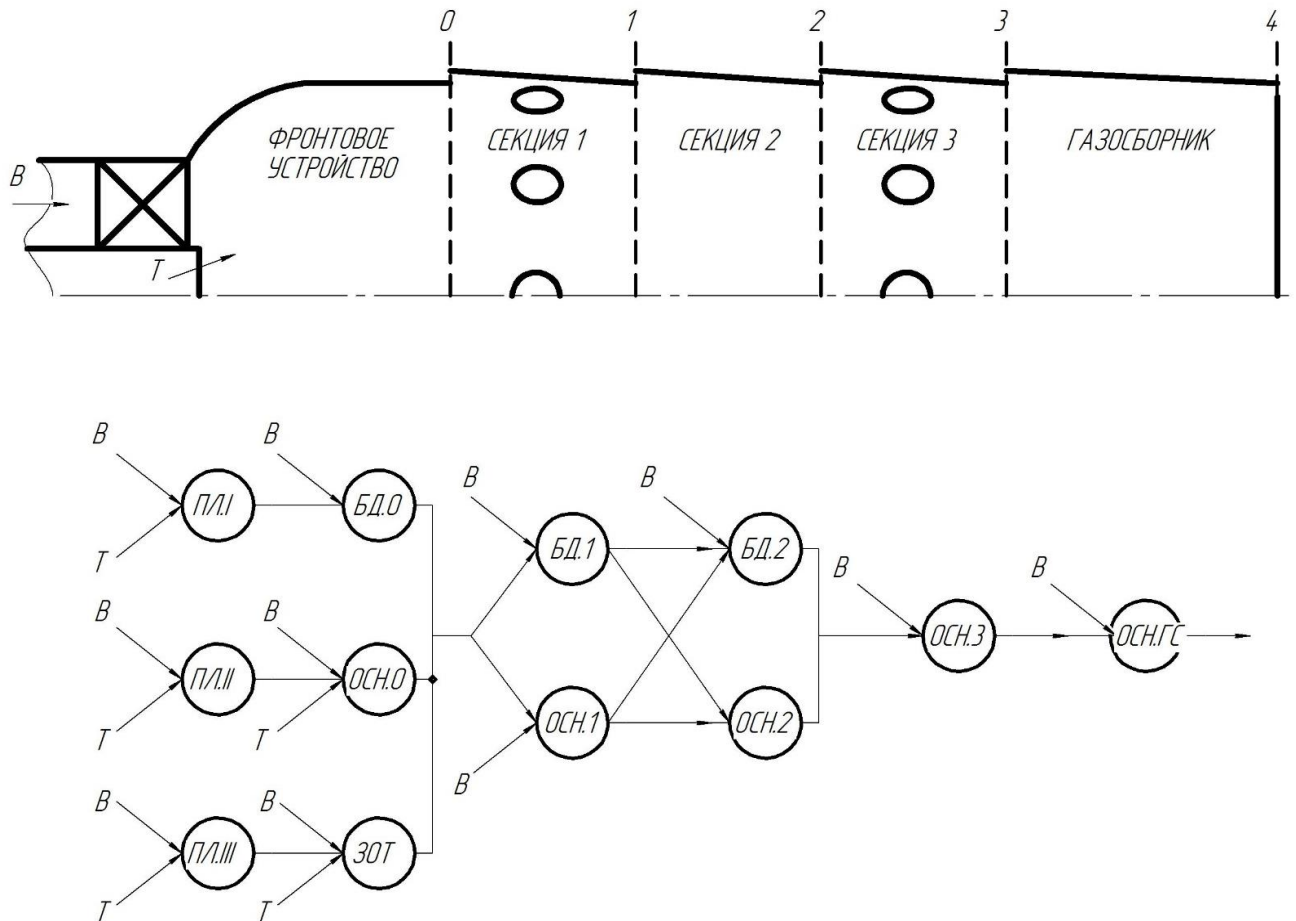


Рисунок 3.16 – Реакторная схема камеры сгорания

Смешение в секции 1 моделируется с допущением, что в первую очередь смешиваются струи газа за фронтовым устройством (БД.0, ОСН.0, ЗОТ), затем происходит смешение газов с основным и охлаждающим воздухом. Это существенно упрощает моделирование. Такое упрощение приемлемо ввиду интенсивного смешения в секции 1, вызванное течением в следе за ЗОТ и наличием высоконапорных струй основного воздуха.

«Бедная» струйка секции 1 БД.1 формируется газом из фронтового устройства и вторичным воздухом. Расходы газа и воздуха, формирующих «бедную» струйку, определяются из соотношения:

$$G_{БД} \cdot r(N_2)_{БД} = G_{ВОЗД} \cdot r(N_2)_{ВОЗД} + (G_{БД} - G_{ВОЗД}) r(N_2)_Г. \quad (3.25)$$

Здесь, $G_{БД}$ – известное значение расхода «бедной» струйки, способ расчета которого приведен выше. $r(N_2)_{БД}$ – известное значение объемной доли азота «бедной» струйки (соответствует $T_{adia} \approx 1450$ К). $G_{ВОЗД}$ – расход воздуха,

идущего на формирование «бедной» струйки. $r(N_2)_{ВОЗД}=0,79$ – объемная доля азота в воздухе. $(G_{БД} - G_{ВОЗД}) = G_{Г}$ – расход газа, идущего на формирование «бедной» струйки. $r(N_2)_{Г}$ – объемная доля содержания азота в газе, известная из CFD результата – сечение ФУ.

Зная количество воздуха и газа, идущего на формирование «бедной» струйки БД.1, из баланса расходов, можно определить расходы воздуха и газа, идущих на формирование основного потока ОСН.1.

Способ моделирования массообмена секции 1 с упрощением об поэтапном смешении неприемлем к секции 2. В секции 2 отсутствуют отверстия подвода основного воздуха, а значит течение более равнонаправлено.

«Бедная» струйка БД.2 секции 2 формируется:

- газом «бедной» струйки секции 1 – БД.1;
- охлаждающим воздухом секции 2;
- газом основной струйки секции 1 – ОСН.1.

Вначале находим часть «бедной» струйки БД.2, которая формируется охлаждающим воздухом и газом основной струйки ОСН.1 (охлаждающий воздух полностью расходуется на формирование «бедной» струйки). Используем выражение:

$$G_{БД.2 \text{ часть1}} = \frac{G_{ОХЛ} \cdot r(N_2)_{ВОЗД} + (G_{БД.2 \text{ часть1}} - G_{ОХЛ}) r(N_2)_{Г.ОСН.1}}{r(N_2)_{БД}}. \quad (3.26)$$

Здесь, $(G_{БД.2 \text{ часть1}} - G_{ОХЛ}) = G_{Г.ОСН.1-ЧАСТЬ}$ - количество газа основной струйки ОСН.1, расходуемого на формирование «бедной» струйки БД.2.

Часть «бедной» струйки секции 1 БД.1, расходуемая на формирование «бедной» струйки секции 2, определяется по выражению:

$$G_{БД.2 \text{ часть2}} = G_{БД.2} - G_{БД.2 \text{ часть1}}. \quad (3.27)$$

Расход газа основной струйки ОСН.2 определяем из баланса расходов.

3.3 Краткое описание разработанного метода расчета выбросов монооксида углерода из камер сгорания ГТД

Разработан метод расчета выбросов монооксида углерода из камер сгорания ГТД, в котором реакторная модель исследуемой камеры сгорания строится на базе результатов трехмерного CFD моделирования (объединяются достоинства реакторного метода и CFD). Особенность метода в выделении зон, лимитирующих окисление монооксида углерода.

Ниже приведена блок-схема разработанного метода (рисунок 3.17) и краткое его описание в виде последовательности действий.

1 Трёхмерное CFD моделирование. Выполняется трёхмерное CFD моделирование камеры сгорания на исследуемом режиме. Применимы стационарные RANS модели турбулентности (SST, k-ε и др.) и экономичные модели горения (например, Eddy Dissipation Model (EDM) с глобальным механизмом химической кинетики, модели семейства Flamelet).

Вычислительные затраты стационарных RANS моделей турбулентности на порядок меньше нестационарных URANS (Unsteady RANS) моделей и в 100-1000 раз меньше по сравнению с LES (Large Eddy Simulation) моделями турбулентности так как LES подход требует более детальной дискретизации (меньшие размеры расчётных ячеек и шагов по времени).

2 «Разбивка» жаровой трубы на расчётные сечения. Жаровая труба «разбивается» на расчётные сечения, исходя из ее конструктивных особенностей и расчётной трёхмерной структуры течения. На базе выбранных расчётных сечений в дальнейшем строится реакторная модель камеры сгорания.

3 Экспорт данных из CFD моделирования. Из расчётных сечений результата CFD моделирования экспортируются массивы данных с составом смеси и массовыми расходами в элементах расчётной сетки.

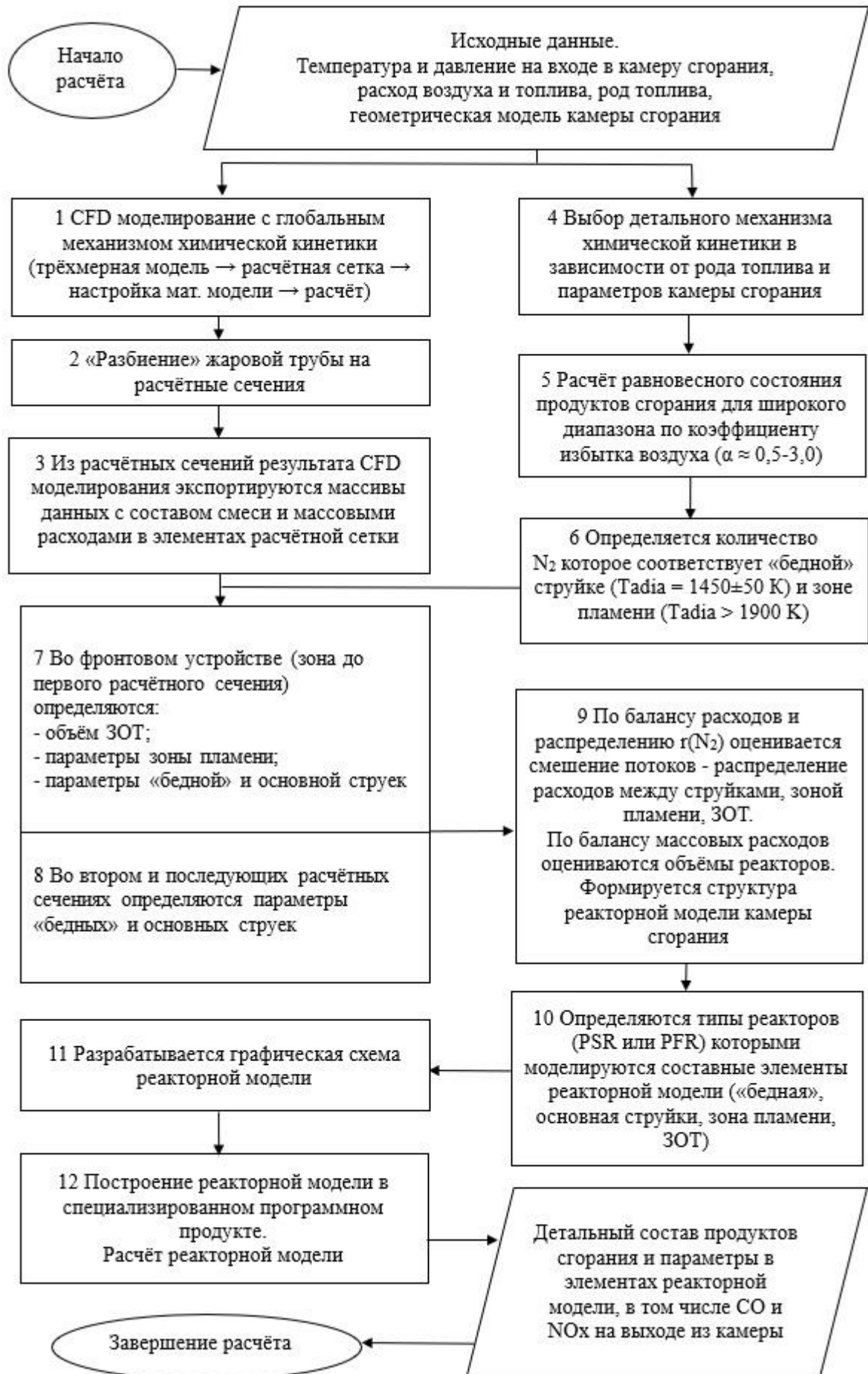


Рисунок 3.17 – Блок-схема метода расчета выбросов CO из камер сгорания ГТД

4 Выбор детального механизма химической кинетики. Для расчёта реакторной модели камеры сгорания требуется детальный механизм химической кинетики окисления топлива. Механизм выбирается в зависимости от рода топлива и рабочего диапазона параметров (давление и температура воздуха на входе в камеру сгорания должны соответствовать этому диапазону).

5 Расчёт равновесного состояния продуктов сгорания. На исследуемом режиме, при заданном давлении и температуре на входе в камеру сгорания, выполняется расчёт равновесного состояния продуктов сгорания для широкого диапазона по коэффициенту избытка воздуха ($\alpha \approx 0,5-3,0$).

6 По результатам расчёта равновесного состояния определяется содержание азота, которое соответствует «бедной» струйке ($T_{adia} = 1450 \pm 50$ K) и зоне пламени ($T_{adia} \geq 1900$ K) согласно внедрённым новым критериям формирования реакторной модели камеры сгорания.

7 Моделирование течения за фронтовым устройством. Фронтовое устройство моделируется первым расчётным сечением реакторной схемы камеры сгорания (рисунок 3.10). Первое сечение выбирается таким образом, что пересекает ЗОТ. В постпроцессоре CFD программы в этом сечении строятся две непересекающиеся поверхности. Первая поверхность – кольцевая над ЗОТ. В ней протекают основная, «бедная» струйки и остатки «чистого» воздуха. Вторая поверхность непосредственно пересекает ЗОТ. Её границы несколько превышают границы ЗОТ так, чтобы среднемассовый расход газа был направлен в сторону выхода камеры сгорания. Такой подход позволяет существенно упростить моделирование ЗОТ – ЗОТ моделируется одним реактором идеального смешения с потоком малого расхода (без организации рециркуляции между реакторами).

Для построения реакторной схемы необходимо оценить объем ЗОТ, параметры «бедной» струйки и зоны пламени.

7.1 Оценка объёма ЗОТ. По результатам CFD моделирования оценивается объём ЗОТ от начала фронтового устройства до первого расчётного сечения (например, по распределению осевой составляющей скорости).

7.2 Оценка объёма и расхода газа в зоне пламени. По результатам CFD моделирования оценивается расположение зоны пламени, её объём и расход газа. Для этого в постпроцессоре CFD программы строится изообъём, в каждой точке которого содержание азота соответствует ранее рассчитанному диапазону объёмной доли азота $r(N_2)$ при $T_{adia} \geq 1900$ К.

Оценка выполняется для зоны от начала фронтального устройства до первого расчётного сечения.

7.3 Выявление «бедной» струйки топливоздушной смеси (ТВС). В предлагаемом методе, в расчётном сечении, «бедные» зоны объединяются в одну «бедную» струйку с составом, соответствующим адиабатической температуре продуктов сгорания $T_{adia} = 1450 \pm 50$ К. Такой подход позволяет более детально учесть наличие «бедных» струек, будь то в пристеночной области или в следе за струями подвода основного воздуха, и повышает точность оценки выбросов CO.

Процедура выявления «бедной» струйки следующая. Из результата CFD моделирования из расчётных ячеек, пересекающих расчётное сечение, экспортируется массив объёмных долей азота и массовых расходов. Далее этот массив сортируется по убыванию $r(N_2)$ – от «бедных» струек к более «богатым». Затем, в отсортированном массиве «бедные» струйки объединяются в одну с составом соответствующим $T_{adia} = 1450 \pm 50$ К (осреднённое значение $r(N_2)$, соответствующее этой температуре, заранее определено по результатам расчёта равновесного состояния продуктов сгорания).

В CFD моделировании с глобальным механизмом химической кинетики азот не участвует в горении и, поэтому, по его содержанию можно оценить состав горючей смеси. Выбор $r(N_2)$ в качестве параметра, определяющего состав смеси, сокращает объём и погрешность вычислений при обработке результата CFD моделирования.

8 Выявляются «бедные» струйки во втором и последующих расчётных сечениях. «Бедные» струйки во втором и последующих расчётных сечениях выявляются по ранее описанному принципу.

9 Формирование структуры реакторной модели камеры сгорания. На базе данных по распределению расходов воздуха по длине жаровой трубы, расходов в «бедных» струйках формируется структура реакторной модели камеры сгорания. Основной принцип – сохранение баланса расхода при оценке смешения и массообмена между реакторами.

Соотношение объёмов реакторов определяется из соотношения их массовых расходов. При этом суммарный объём реакторной модели соответствует объёму жаровой трубы.

Отметим, что после подвода определённого количества воздуха в жаровую трубу «бедная» струйка вырождается – весь поток становится «бедным».

10 Определение типа реакторов. Зоны с интенсивным смешением и большими градиентами скоростей моделируются реактором идеального смешения PSR – зона пламени, ЗОТ, зона подвода основного воздуха. Зоны с более равнонаправленным течением моделируются реактором идеального вытеснения PFR – газосборник камеры сгорания, секции без отверстий подвода основного воздуха.

11 Разрабатывается графическая схема реакторной модели камеры сгорания с выделением зоны пламени и «бедных» струек.

12 Расчёт реакторной модели. Построение и расчёт реакторной модели выполняют в специализированных программных продуктах типа Chemkin-PRO, CANTERA, Kintech Chemical Workbench и др.

По результатам расчёта реакторной модели определяется количество CO на выходе из исследуемой камеры сгорания.

В настоящей работе вычисления выполнены в программных продуктах ANSYS CFX и CANTERA. При этом для расчета реакторной модели с помощью CANTERA необходимо разработать программный код с вызовом из стандартных библиотек подпрограмм расчета задач термохимии. Разработанный программный код уникален для каждой реакторной модели.

Таким образом, в рамках оценки выбросов СО из камер сгорания ГТД по разработанному методу, была также отработана соответствующая вычислительная технология.

На результаты расчетов выбросов СО по предлагаемому методу влияют, в первую очередь, локальный состав и время пребывания горючей смеси, скорость химических реакций в зонах, лимитирующих окисление монооксида углерода. Эти факторы во многом определяются конструкцией камеры сгорания (распределением воздуха), режимными параметрами и родом топлива.

3.4 Критерии и алгоритмы формализованного построения реакторной модели камеры сгорания

Критерии и алгоритмы формализованного построения реакторной модели камеры сгорания приведены в таблице 3.2.

Таблица 3.2 – Критерии и алгоритмы формализованного построения реакторной модели камеры сгорания

Задача, возникающая при построении реакторной модели камеры сгорания	Критерии и алгоритмы построения реакторной модели камеры сгорания
1 Необходимость учета неоднородности состава горючей смеси для повышения точности расчетной оценки выбросов СО	Для учета неоднородности состава горючей смеси (полученной по результатам CFD моделирования) в выбранных расчетных сечениях неравномерно распределенные «бедные» зоны объединяются в одну «бедную» струйку. Эта струйка затем моделируется отдельным элементом в реакторной модели камеры сгорания. Такой подход позволяет учесть наличие низкотемпературных «бедных» зон будь то в пристеночной области или в следе за струями подвода основного воздуха. Не требуется большого количества реакторов для моделирования неоднородности по составу, соответственно, разрабатывается «удобочитаемая» схема реакторной модели камеры сгорания.

Продолжение таблицы 3.2

Задача, возникающая при построении реакторной модели камеры сгорания	Критерии и способы построения реакторной модели камеры сгорания
2 Выявление и моделирование «бедных» струек ТВС	В расчетных сечениях «бедные» зоны объединяются в одну «бедную» струйку с составом, соответствующим адиабатической температуре продуктов сгорания Tadia ≈ 1450±50 К. Принятый диапазон соответствует «бедному» пределу распространения и минимальной температуре пламени (порядка 1400 К для метана [26]). Известно, что на границе «бедного» срыва пламени продукты сгорания содержат большое количество СО ввиду недостаточной скорости реакций окисления. Также температуре $T < 1400$ К соответствует существенное увеличение времени задержки воспламенения метановоздушной смеси (см. раздел 1.2). При этом диапазон по Tadia ≈ 1450±50 К выбран с небольшим запасом для устойчивого розжига горючей смеси в реакторе, который моделирует низкотемпературную «бедную» струйку.
3 Моделирование зоны пламени	Под зоной пламени во фронтном устройстве принимается горючая смесь с составом смеси соответствующим Tadia > 1900 К. При такой температуре уже существенны диссоциация CO₂ в СО (см. раздел 1.2 и результаты расчетов малогабаритной камеры сгорания – таблицы 2.3, 2.4). Расположение зоны пламени в CFD результате, ее объем и расход газа определяются с помощью построения специального изообъема с фильтрацией по требуемому диапазону состава горючей смеси.
4 Моделирование ЗОТ	ЗОТ моделируется одним реактором идеального смешения с потоком малого расхода. Для определения параметров газа в CFD программе строится поверхность, непосредственно пересекающая ЗОТ. Границы этой поверхности несколько превышают границы ЗОТ и определяются условием течения среднemasсового потока в сторону выхода камеры сгорания (итоговый, с учетом противотока, расход газа может быть сколь угодно малым, но направленным по основному потоку). Определяется объем ЗОТ по распределению осевой составляющей скорости (допускается применение других способов).

Продолжение таблицы 3.2

Задача, возникающая при построении реакторной модели камеры сгорания	Критерии и способы построения реакторной модели камеры сгорания
5 Оценка состава горючей смеси (α) в расчетной области CFD результата	В качестве параметра, определяющего состав смеси, выбран $r(N_2)$ – объемная доля азота. При этом таблицы сопоставления «количество азота – коэффициент избытка воздуха» заранее составляются по результатам расчета равновесного состояния продуктов сгорания. Выбор $r(N_2)$ сокращает объем и погрешность вычислений при обработке CFD результата (уменьшает количество суммирований погрешностей осреднения параметров неравномерного потока камеры сгорания).
6 Моделирование смешения потоков	Задача моделирования смешения сводится к оценке распределения и перераспределения рабочего тела в элементах реакторной модели при последовательном движении горючей смеси по потоку (непрерывное смешение потоков заменено на дискретное). Оценка распределения потоков базируется на: - выявленных по результатам CFD моделирования и зафиксированных значениях массовых расходов и содержания N_2 в элементах реакторной модели; - условии соблюдения баланса расходов $G_1 + G_2 = G_{cm};$ - уравнении осреднения количества N_2 по массовому расходу $G_{cm}r(N_2)_{cm} = G_1r(N_2)_1 + G_2r(N_2)_2.$
7 Оценка объемов реакторов	Соотношение объемов реакторов определяется из соотношения их массовых расходов. При этом суммарный объем реакторной модели соответствует объему жаровой трубы.

Продолжение таблицы 3.2

Задача, возникающая при построении реакторной модели камеры сгорания	Критерии и способы построения реакторной модели камеры сгорания
8 Выбор типа реакторов	Зоны с интенсивным смешением и большими градиентами скоростей моделируются реактором идеального смешения PSR – зона пламени, ЗОТ, зона подвода основного воздуха. Зоны с более равнонаправленным течением моделируются реактором идеального вытеснения PFR – газосборник камеры сгорания, секции без отверстий подвода основного воздуха. В секциях без подвода основного воздуха допускается моделирование «бедной» струйки реактором PSR в случае неустойчивого горения в реакторе PFR.
9 Корректировка распределения расходов в реакторной модели (при необходимости)	Если по результатам расчета реакторной модели температура «бедной» струйки выходит из диапазона $T = 1450 \pm 50$ К, то допускается небольшая корректировка распределения расходов газа между реакторами при условии, что массовый расход в реакторе «бедной» струйки изменяется не более чем на 10 % от исходного значения.

Приведенные выше критерии и алгоритмы не используют количественные конструктивные характеристики камеры сгорания, не требуют ввода эмпирических коэффициентов, не вводят ограничений по параметрам на входе - это потенциально позволяет проводить расчеты камер сгорания различной конструкции на различных режимах (т.е. разработанный метод универсален).

В тоже время отметим, что приведенные критерии моделирования «бедных» струек и зоны пламени основаны на количественной оценке процессов горения метановоздушных смесей, т.е. предназначены для природного газа. В случае работы камеры сгорания на керосине, либо другом топливе, требуется проведение дополнительных исследований.

Выводы к третьей главе

1 Разработан новый метод расчёта выбросов монооксида углерода (СО) из камер сгорания ГТД с применением детальной химической кинетики, отличающийся формализованным построением реакторной модели камеры сгорания по результатам трёхмерного CFD моделирования со схематичным описанием структуры течения, распределения воздуха и неравномерности коэффициента избытка воздуха.

Метод предназначен для расчетов камер сгорания ГТД различной конструкции во всем диапазоне рабочих режимов.

2 Для учета неравномерности распределения коэффициента избытка воздуха (α) и повышения точности расчетов разработан критерий, согласно которому неравномерно распределенные «бедные» зоны объединяются в «бедные» струйки и моделируются отдельными реакторами с составом смеси с высоким содержанием СО в продуктах сгорания, чему соответствует $T_{adia} = 1450 \pm 50$ К. Критерий разработан по результатам проведенных расчетных исследований характеристик пламён с применением детальной химической кинетики.

В реакторах, представляющих «бедные» струйки, с помощью детальной кинетики оценивается количество СО, не успевшее окислиться до СО₂.

3 Разработан новый критерий выявления из CFD результата и моделирования реакторами зоны пламени, согласно которому выделяется зона, в которой существенен сдвиг равновесия в сторону СО (существенна диссоциация продуктов сгорания), чему соответствует температура $T_{adia} > 1900$ К в исследованном диапазоне давлений 0,5-10,0 МПа.

4 Процесс построения реакторной модели камеры сгорания формализован и содержит следующие ключевые процедуры:

- CFD моделирование;
- выбор характерных расчетных сечений;
- выявление «бедных» струек в расчетных сечениях (с оценкой расхода газа и других параметров), оценка параметров оставшейся – основной струйки;

- оценка во фронтовом устройстве: объема зоны обратных токов; объема и расхода газа в зоне пламени; параметров «бедной» и основной струек;
- оценка массообмена между элементами реакторной модели по принципу сохранения баланса расходов.

Возможно автоматическое построение реакторной модели исследуемой камеры сгорания с помощью специально разработанной программы обработки результатов CFD моделирования.

5 Разработанные критерии построения реакторной модели не используют количественные конструктивные характеристики камеры сгорания, не требуют ввода корректирующих эмпирических коэффициентов и модификации стандартных математических моделей, не вводят ограничений по параметрам на входе - это позволяет проводить расчеты камер сгорания различной конструкции на различных режимах.

6 Разработанные критерии моделирования «бедных» струек и зоны пламени основаны на количественной оценке процессов горения метановоздушных смесей (природного газа). В случае применения другого топлива могут потребоваться дополнительные исследования, что можно выделить в качестве направления дальнейшего развития настоящей работы.

4 АПРОБАЦИЯ РАЗРАБОТАННОГО МЕТОДА РАСЧЕТА ВЫБРОСОВ МОНООКСИДА УГЛЕРОДА ИЗ КАМЕР СГОРАНИЯ ГТД

4.1 Программный пакет CANTERA

Расчет реакторных моделей камер сгорания выполняют в специальных программных продуктах типа Chemkin-PRO, Chemical Workbench, CANTERA и др. В настоящей работе использован программный продукт CANTERA 2.4.0 с открытым исходным кодом (некоммерческий продукт) [63]. В качестве «интерфейса» работы с CANTERA выбран язык программирования Python 3.7.

CANTERA – это библиотека программ (подпрограмм) для решения задач термодинамики, химической кинетики и переноса компонентов горючей смеси. Применительно к задаче расчета выбросов СО из камер сгорания ГТД с помощью этого программного продукта рассчитываются: равновесное состояние продуктов сгорания; горение в реакторах PSR и PFR; смешение продуктов сгорания.

Для расчета реакторной модели камеры сгорания разрабатывается уникальный (для каждой реакторной модели) программный код с вызовом из стандартных библиотек необходимых подпрограмм.

4.1.1 Расчет равновесного состояния

Ниже, в качестве примера, приведен код программы расчета равновесного состояния метановоздушной смеси. Параметры смеси: исходная температура 470 К; коэффициент избытка воздуха $\alpha = 2,7$ (это соответствует коэффициенту избытка топлива $\phi = 1/\alpha = 0,37$); давление 0,5 МПа.

```
#импортируем программный продукт CANTERA  
import cantera as ct
```

```
# создаем материал "gas", механизм GRI-Mech 3.0  
gas = ct.Solution('gri30.xml')
```

```
# задаем коэффициент избытка топлива, состав топлива и окислителя
```

```
gas.set_equivalence_ratio(phi=0.37, fuel="CH4:1", oxidizer="O2:0.21,N2:0.79")
```

```
# задаем температуру и давление исходной смеси
```

```
gas.TP = 470.0, 5e5
```

```
# команда на расчет равновесного состояния (H=const; p = const)
```

```
gas.equilibrate('HP')
```

```
# вывод результатов расчета
```

```
gas ()
```

Результаты расчета равновесного состояния приведены на рисунке 4.1.

```
gri30:
```

temperature	1358.05	K	
pressure	500000	Pa	
density	1.25633	kg/m^3	
mean mol. weight	28.3714	amu	

	1 kg	1 kmol	
enthalpy	82376	2.337e+06	J
internal energy	-3.1561e+05	-8.954e+06	J
entropy	8321.4	2.361e+05	J/K
Gibbs function	-1.1218e+07	-3.183e+08	J
heat capacity c_p	1278.9	3.628e+04	J/K
heat capacity c_v	985.85	2.797e+04	J/K

	X	Y	Chem. Pot. / RT
H2	2.19887e-08	1.56237e-09	-34.3542
H	1.79093e-10	6.36255e-12	-17.1771
O	7.74272e-08	4.36632e-08	-13.9661
O2	0.127125	0.143378	-27.9322
OH	1.02261e-05	6.13004e-06	-31.1432
H2O	0.0747891	0.0474895	-48.3203
HO2	5.63027e-08	6.55014e-08	-45.1093
H2O2	5.007e-09	6.00291e-09	-62.2864
CO	2.19632e-08	2.16837e-08	-52.2867
CO2	0.0373971	0.0580104	-66.2528
NO	0.00043662	0.000461777	-26.1556
NO2	6.54656e-06	1.06155e-05	-40.1217
N2O	6.19207e-08	9.60581e-08	-38.3451
HNO	2.74304e-11	2.99854e-11	-43.3327
N2	0.760235	0.750643	-24.379
[+38 minor]	2.75786e-15	1.97996e-15	

Рисунок 4.1 – Результаты расчета равновесного состояния

Здесь и далее на рисунках с результатами расчетов: X – объемная доля i -го компонента; Y – массовая доля.

4.1.2 Моделирование реактора идеального смешения

Реактор идеального смешения PSR моделируется в пакете CANTERA по следующей схеме (см. рисунок 4.2) [63, 69].

В начале, в объекте «Резервуар 1» («Reservoir») задаются параметры исходной горючей смеси – температура, давление и компонентный состав. Резервуар представляет собой условный сосуд неограниченного объема с жестко зафиксированными параметрами газа (т.е. значения параметров газа резервуара не изменяются в ходе моделирования).

Далее следует «регулятор расхода» («Mass Flow Controller»), который определяет количество горючей смеси, поступающей из резервуара 1 в реактор. Постоянное давление в реакторе поддерживается с помощью объекта «регулятор давления» («Pressure Controller»). За регулятором давления установлен резервуар 2, в который поступают продукты сгорания.

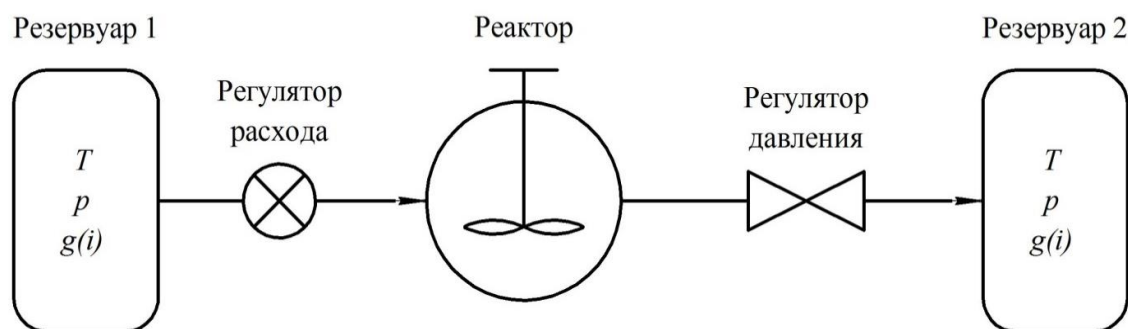


Рисунок 4.2 – Схема моделирования реактора идеального смешения в CANTERA

В качестве примера выполним расчет PSR со следующими параметрами:

- температура исходной горючей смеси $T = 400$ К;
- давление $p = 0,3$ МПа;
- коэффициент избытка воздуха $\alpha = 1,8$ ($\phi = 1/\alpha = 0,556$);
- массовый расход горючей смеси $G = 0,025$ кг/с;
- объем реактора $V = 10^{-4}$ м³.

Ниже приведен код программы расчета реактора.

```

# импортируем программный продукт CANTERA
import cantera as ct

# создаем объект (материал) "gas", механизм GRI-Mech 3.0
gas = ct.Solution('gri30.xml')

# задаем коэффициент избытка топлива, состав топлива и окислителя
gas.set_equivalence_ratio(phi=0.556, fuel="CH4:1", oxidizer="O2:0.21,N2:0.79")

# задаем температуру и давление исходной смеси
gas.TP = 400.0, 3e5

# создаем резервуар 1 для исходной смеси
Reservoir1 = ct.Reservoir(gas)

# приводим объект "gas" в равновесное состояние (H=const; p = const)
gas.equilibrate('HP')

# создаем резервуар 2
Reservoir2 = ct.Reservoir(gas)

# создаем объект "Реактор"
RCT = ct.IdealGasReactor(gas)

#определяем объем реактора
RCT.volume = 10e-4

# создаем регулятор расхода и задаем массовый расход
inlet_RCT = ct.MassFlowController(Reservoir1, RCT, mdot = 0.025 )

# создаем регулятор давления
outlet_RCT = ct.PressureController(RCT, Reservoir2, master=inlet_RCT, K=0.01)

# запуск расчета реактора до установления стационарного решения
sim = ct.ReactorNet([RCT])
sim.set_initial_time(0.0)
sim.advance_to_steady_state()

# вывод результатов расчета
gas ()

```

Результаты расчета приведены на рисунке 4.3.

gri30:			
temperature	1659.54	K	
pressure	300000	Pa	
density	0.611645	kg/m ³	
mean mol. weight	28.1319	amu	
	1 kg	1 kmol	
	-----	-----	
enthalpy	-38397	-1.08e+06	J
internal energy	-5.2888e+05	-1.488e+07	J
entropy	8843.1	2.488e+05	J/K
Gibbs function	-1.4714e+07	-4.139e+08	J
heat capacity c _p	1358.4	3.822e+04	J/K
heat capacity c _v	1062.9	2.99e+04	J/K
	X	Y	Chem. Pot. / RT
	-----	-----	-----
H2	5.31827e-05	3.81097e-06	-27.6576
H	5.59547e-06	2.00481e-07	-11.2473
O	5.96064e-05	3.38998e-05	-12.2463
O2	0.0882062	0.100331	-29.4612
OH	0.000582917	0.000352406	-28.8364
H2O	0.109846	0.0703439	-45.3313
HO2	3.93297e-06	4.61449e-06	-42.453
H2O2	1.77547e-07	2.14675e-07	-58.1839
C	1.28981e-14	5.50687e-15	-0.214341
CH	6.04317e-11	2.79667e-11	-4.43063
CH2	4.97609e-08	2.48113e-08	-14.9389
CH2(S)	4.09418e-09	2.0414e-09	-13.9558
CH3	5.63926e-06	3.01385e-06	-28.8785
CH4	3.18048e-05	1.81373e-05	-42.8004
CO	0.000444371	0.000442452	-41.7285
CO2	0.0546503	0.0854955	-61.0448
HCO	2.09432e-08	2.16031e-08	-44.9353
CH2O	3.03429e-06	3.23861e-06	-50.9572
CH2OH	4.83952e-09	5.3388e-09	-55.2386
CH3O	3.95554e-09	4.36363e-09	-50.7567
CH3OH	7.4047e-07	8.43393e-07	-63.5578
C2H	3.62356e-12	3.22401e-12	-14.9763
C2H2	1.20696e-08	1.11712e-08	-30.914
C2H3	1.57659e-10	1.51572e-10	-34.5437
C2H4	2.9272e-08	2.91907e-08	-46.2351
C2H5	5.17334e-10	5.34433e-10	-49.9318
C2H6	6.50521e-09	6.9533e-09	-60.8046
HCCO	2.6127e-10	3.81053e-10	-44.2647
CH2CO	1.79877e-08	2.6879e-08	-56.7459
HCCOH	4.79479e-09	7.16482e-09	-48.7065
N	4.90871e-12	2.44402e-12	-11.377
NH	2.41366e-11	1.28823e-11	-22.5132
NH2	1.47795e-10	8.41769e-11	-35.1745
NH3	5.30949e-10	3.21427e-10	-51.6737
NNH	2.24301e-11	2.31393e-11	-36.7839
NO	3.76343e-06	4.01416e-06	-33.5266
NO2	3.26357e-08	5.33708e-08	-47.4498
N2O	1.2158e-06	1.90214e-06	-38.2018
HNO	9.00244e-11	9.92477e-11	-45.2418
CN	5.01444e-13	4.63759e-13	-23.1438
HCN	4.18973e-09	4.02498e-09	-37.6701
H2CN	1.77962e-14	1.77341e-14	-45.1508
HCNN	3.91708e-13	5.71334e-13	-30.6607
HCNO	1.21379e-08	1.85637e-08	-40.3897
HOCN	5.9158e-10	9.04766e-10	-56.2241
HNCO	1.712e-08	2.61834e-08	-60.5732
NCO	4.01337e-10	5.99427e-10	-44.1771
N2	0.746101	0.742961	-25.526
C3H8	4.7521e-13	7.44888e-13	-80.7573
CH2CHO	3.47409e-11	5.31578e-11	-61.6206
CH3CHO	7.0789e-10	1.10852e-09	-72.8125
[+2 minor]	6.35748e-15	9.73752e-15	

Рисунок 4.3 – Результаты расчета реактора PSR

4.1.3 Моделирование реактора идеального вытеснения

Известен способ моделирования реактора идеального вытеснения с помощью цепи из последовательно расположенных PSR [63, 79] (рисунок 4.4). В работе [79] отмечается, что применительно к задаче оценки образования/выгорания CO, необходимо, чтобы цепь состояла не менее чем из 25 реакторов PSR. В настоящей работе количество элементов цепи – 2000.

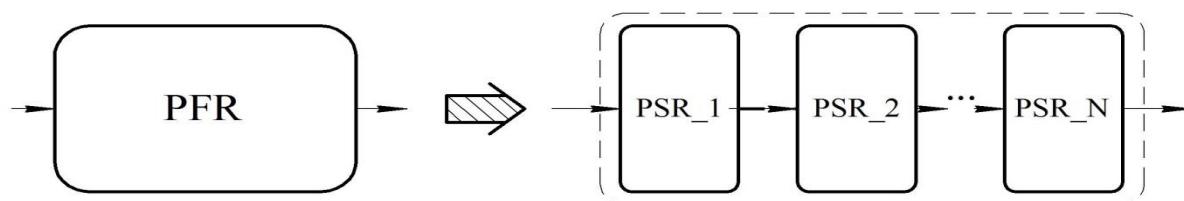


Рисунок 4.4 – Моделирование реактора PFR с помощью сети из реакторов PSR

В качестве примера рассмотрим PFR со следующими параметрами:

- температура потока на входе 1345 K;
- состав: $g(\text{CH}_4) = 0,0013$; $g(\text{O}_2) = 0,137$; $g(\text{CO}_2) = 0,061$; $g(\text{H}_2\text{O}) = 0,051$;
 $g(\text{CO}) = 0,00081$; $g(\text{N}_2) = 0,74889$;
- давление 0,45 МПа;
- массовый расход горючей смеси $G = 0,025$ кг/с;
- объем реактора $V = 10^{-4}$ м³.

Ниже приведен код программы расчета данного реактора.

```
#импортируем программный продукт CANTERA
import cantera as ct

# создаем объект (материал) "gas", механизм GRI-Mech 3.0
gas = ct.Solution('gri30.xml')

# задаем состав горючей смеси
gas.Y = 'CH4:0.0013, O2:0.137, CO2:0.061, H2O:0.051, CO:0.00081, N2:0.74889'

# задаем температуру и давление исходной смеси
gas.TP = 1345.0, 4.5e5
```

```

# расход горючей смеси
G = 0.025

# количество элементов в цепи из PSR
n_steps = 2000

# объем единичного PSR
r_vol=10e-4/n_steps

# создаем объект Реактор
KS = ct.IdealGasReactor(gas)
KS.volume = r_vol

# создаем резервуары для входа и выхода
upstream = ct.Reservoir(gas, name='upstream')
downstream = ct.Reservoir(gas, name='downstream')

# регуляторы расхода и давления
m = ct.MassFlowController(upstream, KS, mdot=G)
v = ct.PressureController(KS, downstream, master=m, K=1e-5)

# моделирование PFR цепью из 2000 PSR
sim2 = ct.ReactorNet([KS])

for n in range(n_steps):
    gas.TDY = KS.thermo.TDY
    upstream.syncState()
    sim2.reinitialize()
    sim2.advance_to_steady_state()

gas()

```

Ниже приведены результаты расчета – параметры на выходе из реактора PFR (рисунок 4.5).

gri30:

temperature	1401.67	K	
pressure	450000	Pa	
density	1.09301	kg/m ³	
mean mol. weight	28.3068	amu	
	1 kg	1 kmol	
	-----	-----	
enthalpy	-10492	-2.97e+05	J
internal energy	-4.222e+05	-1.195e+07	J
entropy	8420.7	2.384e+05	J/K
Gibbs function	-1.1813e+07	-3.344e+08	J
heat capacity c _p	1295.7	3.668e+04	J/K
heat capacity c _v	1002	2.836e+04	J/K
	X	Y	Chem. Pot. / RT
	-----	-----	-----
H2	5.47612e-08	3.89984e-09	-33.6365
H	5.53839e-10	1.9721e-11	-16.8163
O	1.57454e-07	8.89953e-08	-14.1112
O2	0.116192	0.131346	-28.2273
OH	1.71332e-05	1.0294e-05	-30.9316
H2O	0.0847134	0.0539142	-47.7519
HO2	7.88221e-08	9.19095e-08	-45.046
H2O2	6.94031e-09	8.33979e-09	-61.8635
CH4	2.00126e-14	1.13421e-14	-63.48
CO	6.31342e-08	6.24732e-08	-51.127
CO2	0.042347	0.0658388	-65.3001
CH2O	2.20222e-14	2.33599e-14	-69.8069
C2H2	2.7388e-11	2.51928e-11	-32.5008
CH2CO	2.05176e-12	3.04699e-12	-64.7571
HCCOH	2.02353e-08	3.00506e-08	-44.4547
NH2	1.27723e-14	7.22955e-15	-40.8788
NH3	6.68691e-13	4.02313e-13	-57.689
NO	4.85353e-09	5.14491e-09	-38.0172
NO2	5.61366e-11	9.1236e-11	-52.135
N2O	1.45192e-07	2.25752e-07	-37.9769
HCN	1.23792e-13	1.1819e-13	-45.1658
HCNO	3.52974e-13	5.36506e-13	-47.0509
HOCN	1.32075e-12	2.00748e-12	-61.0519
HNCO	1.03932e-12	1.57972e-12	-70.3831
N2	0.75673	0.74889	-24.5834
[+28 minor]	1.33698e-14	1.29721e-14	

Рисунок 4.5 – Результаты расчета PFR (параметры на выходе)

4.1.4 Моделирование смешения потоков

При построении реакторных моделей камер сгорания часто возникает задача расчета смешения потоков (например, смешение продуктов сгорания с воздухом).

Рассмотрим задачу смешения потоков, условия которой приведены на рисунке 4.6.

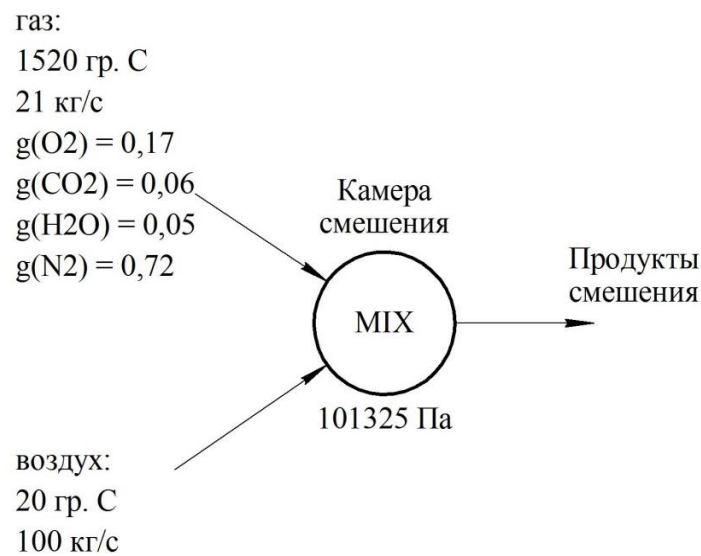


Рисунок 4.6 – Смешение потоков

Ниже приведен код программы расчета.

```
import cantera as ct
```

```
# создаем резервуар для газа (1520 гр.С = 1793 К)  
gas = ct.Solution('gri30.xml')  
gas.TPY = 1793.0, 101325, 'O2:0.17, CO2:0.06, H2O:0.05, N2:0.72'  
R_PS = ct.Reservoir(gas)
```

```
# создаем резервуар для воздуха  
air = ct.Solution('gri30.xml')  
air.TPX = 293, 101325, 'O2:0.21, N2:0.79'  
R_air = ct.Reservoir(air)
```

```
# определяем расходы газа и воздуха  
G_gas = 21  
G_air = 100
```

```
# создаем материал для продуктов смешения  
PS = ct.Solution('gri30.xml')
```

```
# смешиваем газ с воздухом и создаем резервуар для продуктов смешения  
G = ct.Quantity(gas, constant = 'HP')  
A = ct.Quantity(air, constant = 'HP')  
G.mass = G_gas  
A.mass = G_air
```

```

M = G + A
PS.TPX = M.TPX
R_PS = ct.Reservoir(PS)

```

```
PS()
```

Результаты расчетов приведены на рисунке 4.7.

```

gri30:

      temperature      596.02  K
      pressure         101325  Pa
      density          0.588444 kg/m^3
      mean mol. weight  28.7795 amu

      1 kg      1 kmol
      -----
      enthalpy      99699      2.869e+06  J
      internal energy -72492      -2.086e+06  J
      entropy        7646.2      2.201e+05  J/K
      Gibbs function -4.4576e+06      -1.283e+08  J
      heat capacity c_p      1065.5      3.066e+04  J/K
      heat capacity c_v      776.57      2.235e+04  J/K

      X      Y      Chem. Pot. / RT
      -----
      O2      0.199663      0.221998      -26.982
      H2O      0.0138627      0.00867769      -76.5815
      CO2      0.00680957      0.0104132      -111.051
      N2      0.779665      0.758912      -23.962
      [ +49 minor]      0      0

```

Рисунок 4.7 – Результаты расчета смешения потоков

4.1.5 Реакторная модель камеры сгорания

Рассмотрим реакторную модель камеры сгорания ГТД, состоящую из двух элементов (рисунок 4.8). Первый – реактор PSR, который моделирует основную зону горения. Второй – реактор PFR, который моделирует догорание топлива после смешения продуктов неполного сгорания с воздухом (для упрощения схемы смешение потоков не выделяется в отдельный элемент реакторной модели).

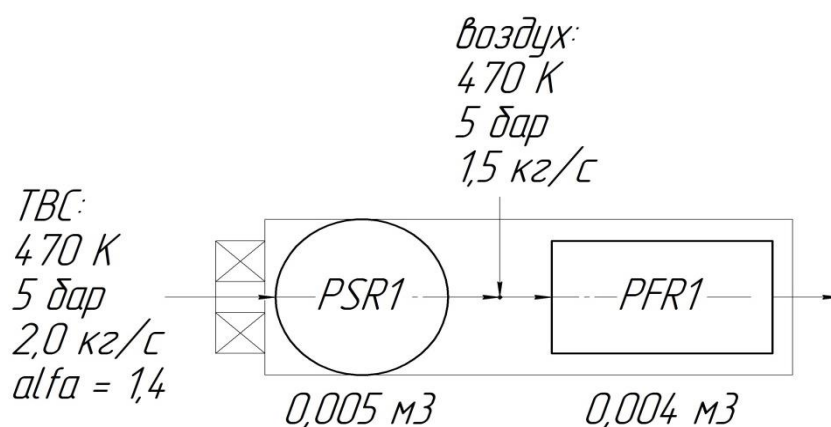


Рисунок 4.8 – Реакторная модель камеры сгорания

Несмотря на очевидную простоту такой модели, она позволяет решить ряд теоретических и практических задач и нашла широкое применение в ранних расчетных исследованиях. Например, модель позволяет оценить характер изменения трендов параметров в зависимости от различных факторов.

На рисунке 4.8 также расписаны условия рассматриваемой задачи. Ниже приведен код программы расчета реакторной модели камеры сгорания.

```
#импортируем программный продукт CANTERA
import cantera as ct

# ***** = РЕАКТОР PSR1 = *****

# создаем объект (материал) "gas", механизм GRI-Mech 3.0
gas = ct.Solution('gri30.xml')

# задаем коэффициент избытка топлива (phi = 1/alfa)
gas.set_equivalence_ratio(phi=0.7143, fuel="CH4:1", oxidizer="O2:0.21,N2:0.79")

# задаем температуру и давление исходной смеси
gas.TP = 470.0, 5e5

# создаем резервуар 1 для исходной смеси
Reservoir1 = ct.Reservoir(gas)

# приводим объект "gas" в равновесное состояние -
# равновесные продукты сгорания будут начальным состоянием реактора
gas.equilibrate('HP')

# создаем резервуар 2 для выхлопа продуктов сгорания
```

```

Reservoir2 = ct.Reservoir(gas)

# создаем объект "Реактор"
PSR1 = ct.IdealGasReactor(gas)

#определяем объем реактор
PSR1.volume = 0.005

# создаем регулятор расхода и задаем массовый расход
inlet_PSR1 = ct.MassFlowController(Reservoir1, PSR1, mdot = 2.0)

# создаем регулятор давления
outlet_PSR1 = ct.PressureController(PSR1, Reservoir2, master=inlet_PSR1, K=0.01)

# запуск расчета реактора до установления стационарного решения
sim = ct.ReactorNet([PSR1])
sim.set_initial_time(0.0)
sim.advance_to_steady_state()

# создаем резервуар для продуктов сгорания PSR1
Res_outPSR1 = ct.Reservoir(gas)

# вывод результатов расчета PSR1
gas ()

# ***** = СМЕШЕНИЕ ПОТОКОВ = *****

# создаем объект (материал) воздух - "air"
air = ct.Solution('gri30.xml')

# задаем параметры и состав воздуха
air.TPX = 470, 5e5, 'O2:0.21, N2:0.79'
R_air = ct.Reservoir(air)

# определяем расходы газа и воздуха
G_gas = 2.0
G_air = 1.5

# создаем материал для продуктов смешения
PS = ct.Solution('gri30.xml')

# смешиваем газ с воздухом и создаем резервуар для продуктов смешения
G = ct.Quantity(gas, constant = 'HP')
A = ct.Quantity(air, constant = 'HP')
G.mass = G_gas
A.mass = G_air
M = G + A
PS.TPX = M.TPX
R_PS = ct.Reservoir(PS)

```

PS()

```
# ***** = МОДЕЛИРОВАНИЕ PFR1 = *****

# расход горючей смеси
G = G_gas + G_air

# количество элементов в цепи из PSR
n_steps = 2000

# объем единичного PSR
r_vol=0.004/n_steps

# создаем объект Реактор (i-тый реактор цепи)
KS = ct.IdealGasReactor(gas)
KS.volume = r_vol

# создаем резервуары для входа и выхода
upstream = ct.Reservoir(gas, name='upstream')
downstream = ct.Reservoir(gas, name='downstream')

# регуляторы расхода и давления
m = ct.MassFlowController(upstream, KS, mdot=G)
v = ct.PressureController(KS, downstream, master=m,K=1e-5)

# моделирование PFR цепью из 2000 PSR
sim2 = ct.ReactorNet([KS])

for n in range(n_steps):
    gas.TDY = KS.thermo.TDY
    upstream.syncState()
    sim2.reinitialize()
    sim2.advance_to_steady_state()

gas()
```

Результаты расчета реакторной модели приведены на рисунке 4.9.

gri30:			
temperature	1421.26	K	
pressure	500000	Pa	
density	1.19871	kg/m ³	
mean mol. weight	28.3304	amu	
	1 kg	1 kmol	
	-----	-----	
enthalpy	74760	2.118e+06	J
internal energy	-3.4235e+05	-9.699e+06	J
entropy	8397.3	2.379e+05	J/K
Gibbs function	-1.186e+07	-3.36e+08	J
heat capacity c _p	1294.4	3.667e+04	J/K
heat capacity c _v	1000.9	2.836e+04	J/K
	X	Y	Chem. Pot. / RT
	-----	-----	-----
H2	1.64002e-06	1.16698e-07	-30.1712
H	5.44905e-08	1.93867e-09	-12.4072
O	2.36499e-06	1.33562e-06	-11.6189
O2	0.120742	0.136377	-28.1277
OH	6.33023e-05	3.80018e-05	-29.606
H2O	0.0807671	0.0513598	-47.4604
HO2	9.83648e-07	1.14601e-06	-42.4905
H2O2	6.71638e-08	8.06398e-08	-59.4044
CH3	2.17911e-14	1.15644e-14	-45.1169
CH4	8.11021e-14	4.59261e-14	-61.9723
CO	0.000147256	0.000145593	-43.1785
CO2	0.0402531	0.0625312	-64.847
HCO	3.37909e-14	3.46114e-14	-56.5659
CH2O	1.27062e-13	1.34668e-13	-67.8939
CH3OH	1.94363e-14	2.19829e-14	-81.7132
C2H2	3.23008e-11	2.96871e-11	-32.5837
CH2CO	4.04845e-12	6.00719e-12	-64.0184
HCCOH	1.44346e-09	2.14183e-09	-47.1903
N	3.55176e-14	1.75602e-14	-9.73931
NH	4.91874e-12	2.60686e-12	-18.7897
NH2	4.00967e-10	2.26773e-10	-30.7005
NH3	5.52759e-09	3.32286e-09	-48.5776
NNH	2.77443e-13	2.8421e-13	-36.9482
NO	1.89863e-05	2.01094e-05	-29.7912
NO2	7.43181e-07	1.20685e-06	-42.6444
N2O	9.0771e-07	1.41018e-06	-36.2033
HNO	4.13724e-11	4.52915e-11	-43.5313
CN	8.38041e-14	7.69631e-14	-18.6023
HCN	1.63834e-08	1.56289e-08	-33.4843
HCNO	4.32379e-08	6.56651e-08	-35.5192
HOCN	4.29212e-09	6.51841e-09	-52.9279
HNCO	6.62462e-08	1.00608e-07	-59.1603
NCO	3.71932e-10	5.51618e-10	-41.3427
N2	0.758001	0.749523	-24.5181
[+19 minor]	8.45076e-15	1.11654e-14	

Рисунок 4.9 – Результаты расчета реакторной модели камеры сгорания, параметры на выходе из камеры сгорания

4.2 Расчет выбросов монооксида углерода из камеры сгорания наземной энергетической установки

4.2.1 Исследуемая камера сгорания

Исследовалась камера сгорания наземной газотурбинной энергетической установки ГТЭ-10/953 номинальной мощностью 8 МВт [37]. ГТЭ-10/953 создана на базе высоконадежного авиационного двигателя типа Р-95Ш. Основной задачей при конвертировании авиационного двигателя в наземную установку был перевод работы камеры сгорания с жидкого топлива на природный газ с обеспечением требований ГОСТ 29328 по допустимому содержанию оксидов азота NO_x в продуктах сгорания (не более 50 мг/нм^3). Работы по конвертированию камеры сгорания выполнены в ОКБ «Мотор» под руководством к.т.н. Гребенюка Г.П. [37, 10, 14, 43, 44].

Доводка конвертированной камеры сгорания выполнена на одnogорелочном отсеке на стенде горячих продувок ОКБ «Мотор» в период 2000-2001 гг. Подтверждение экологических характеристик камеры сгорания выполнено на стендовой базе АО «Авиадвигатель» испытаниями на «чистом» подогретом воздухе [37, 44]. В ходе работ определены следующие характеристики камеры сгорания:

- полнота сгорания топлива ($\eta_r = f(\alpha)$);
- потери полного давления;
- радиальная и окружная неравномерность температурного поля газов на выходе;
- температура стенок жаровой трубы (измерения выполнены с помощью ХА термопар и термоиндикаторных красок ТР-10 – см. рисунок 4.10);
- концентрация вредных веществ на выходе (NO_x , CO);
- диапазон устойчивого горения по коэффициенту избытка воздуха;
- пульсации давления.

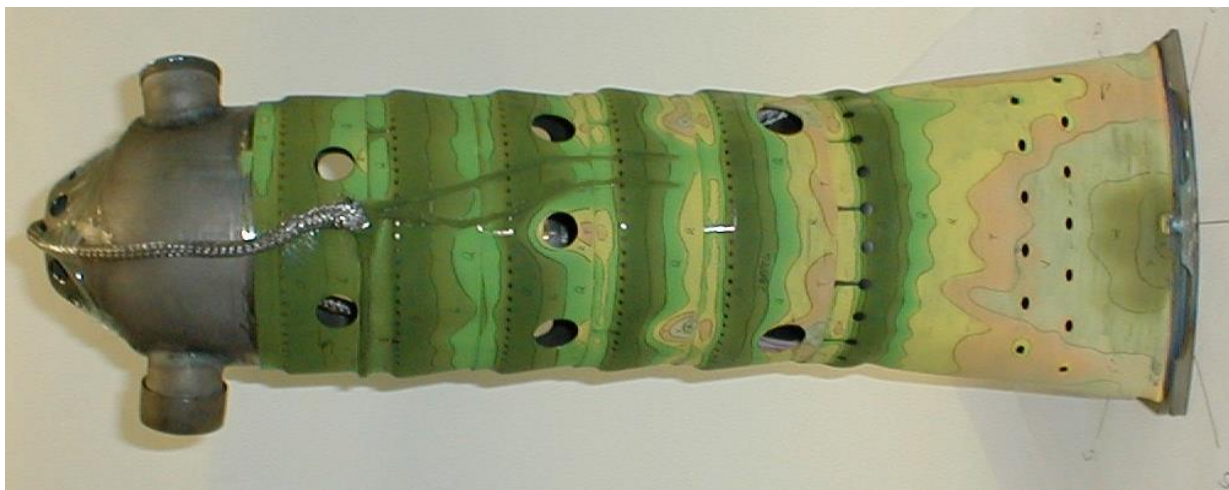


Рисунок 4.10 – Жаровая труба камеры сгорания ГТЭ-10/953 с нанесенной термоиндикаторной краской [13, 44]

Измерение концентраций вредных веществ продуктов сгорания выполнялось с помощью газоанализаторов IMR 3010P и Testo 350. Пробы газа из потока отбирались тремя охлаждаемыми водой пробоотборниками. В стенке пробоотборника имелось пять отверстий, т.е. пробы газа на выходе из камеры сгорания отбирались в 15 координатах. Анализируемый газ подавался в приборы по обогреваемому трубопроводу с температурой стенки порядка 150 °С.

По результатам экспериментально-расчетных исследований выбрана конструкция камеры сгорания с оптимальным законом распределения состава ТВС по длине жаровой трубы, обеспечившим устойчивое горение с высокой полнотой сгорания на рабочих режимах ($\eta_{\Gamma} \geq 0,99$) в условиях высокой приведенной скорости воздуха на входе в камеру сгорания $\lambda_k = 0,4$. Получена концентрация оксидов азота в продуктах сгорания, при условном содержании 15 % кислорода, $[\text{NO}_x] = 38 \text{ мг/нм}^3$. Последующие многократные измерения химического состава продуктов сгорания ГТД подтвердили достигнутый уровень концентрации оксидов азота $[\text{NO}_x] \leq 50 \text{ мг/нм}^3$.

Допустимый по ГОСТ 29328 уровень выбросов NO_x получен за счет реализации процесса сжигания топлива по концепции «богато-бедного» горения (RQL – Rich-Quench-Lean) без предварительного перемешивания ТВС. Успешная реализация данной концепции позволяет получить преимущество

конвертированной камеры сгорания с базовой конструкцией в тех же габаритных размерах, и широкий диапазон устойчивого горения.

Схема экспериментального одnogорелочного отсека приведена на рисунке 4.11. Жаровая труба камеры сгорания состоит из фронтального устройства с периферийным завихрителем, пяти секций и газосборника. Форсунка – одноконтурная со струйной подачей природного газа. Система охлаждения – конвективно-пленочная.

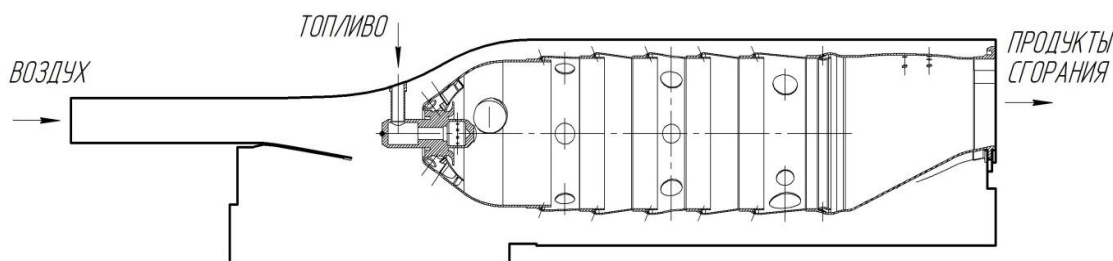


Рисунок 4.11 - Одnogорелочный отсек камеры сгорания ГТЭ-10/953

В широком диапазоне по коэффициенту избытка воздуха обеспечено сжигание основной массы топлива ко второму ряду отверстий за счет интенсивного перемешивания ТВС с развитой поверхностью окисления, генерируемой закруткой потока воздуха периферийным завихрителем [2]. На рисунке 4.12 показаны изменения относительной площади ЗОТ по длине жаровой трубы для двух типов завихрителей – осевой центральный завихритель и периферийный завихритель. Видно, что периферийный завихритель обеспечивает в зоне горения большую на ~ 20 % площадь ЗОТ. Обширная ЗОТ обеспечивает высокоэффективный процесс горения топливного газа [10].

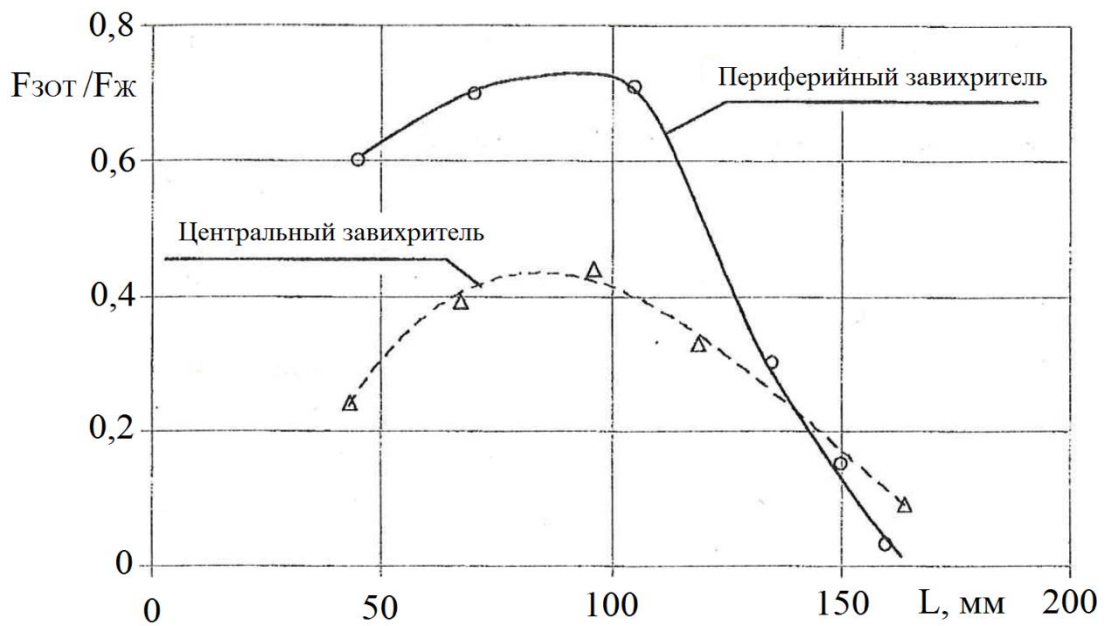


Рисунок 4.12 – Влияние типа завихрителя фронтального устройства на относительную площадь ЗОТ [10]

4.2.2 Расчет и пример доработки камеры сгорания серийной (исходной) компоновки

По разработанному методу выполнена расчетная оценка выбросов СО на выходе из камеры сгорания исходной компоновки – распределение воздуха по длине жаровой трубы соответствует серийной камере сгорания, керосиновая форсунка заменена на газовую.

Расчет выполнен на режиме $\alpha_{\text{КС}} = 3,93$ (см. таблицу 4.1).

Полученное по результатам CFD моделирования распределение температуры газов приведено на рисунке 4.13 (мат. модель CFD моделирования аналогична описанной ниже в разделе 4.2.3). Разработанная реакторная модель камеры сгорания приведена на рисунке 4.14. Распределение параметров по длине по результатам расчета реакторной модели приведено на рисунке 4.15. Данные по расчету реакторной модели приведены в таблице 4.1.

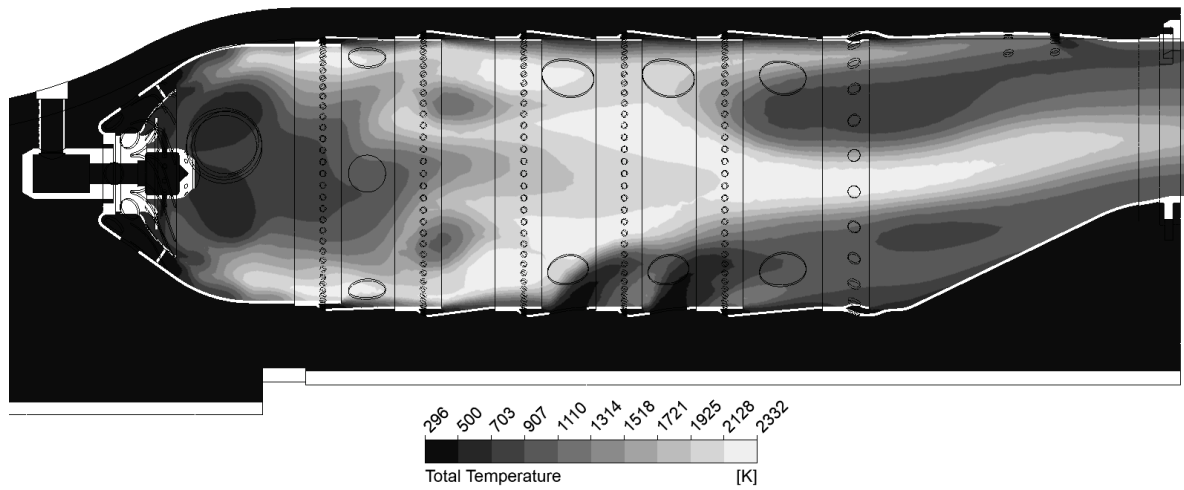


Рисунок 4.13 – Распределение полной температуры (серийная компоновка,
 $\alpha_{\text{КС}} = 3,93$)

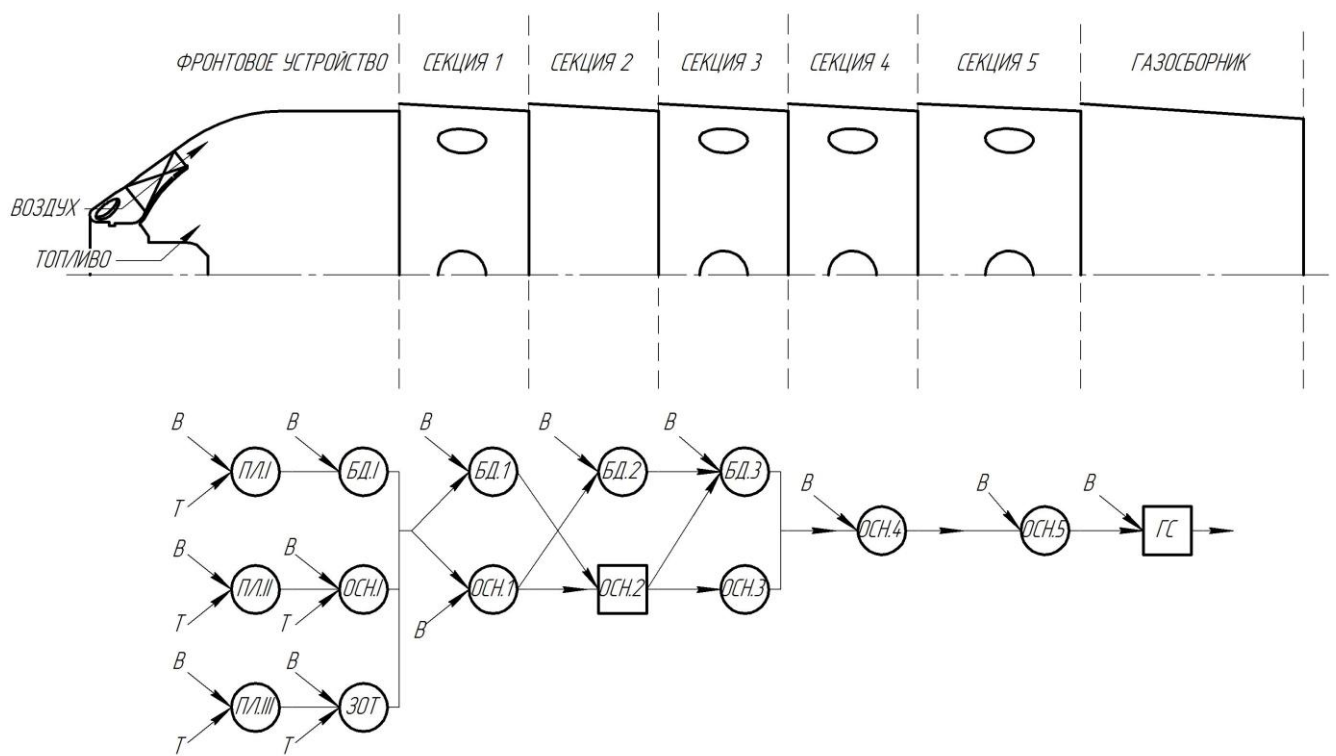


Рисунок 4.14 – Реакторная модель камеры сгорания серийной компоновки

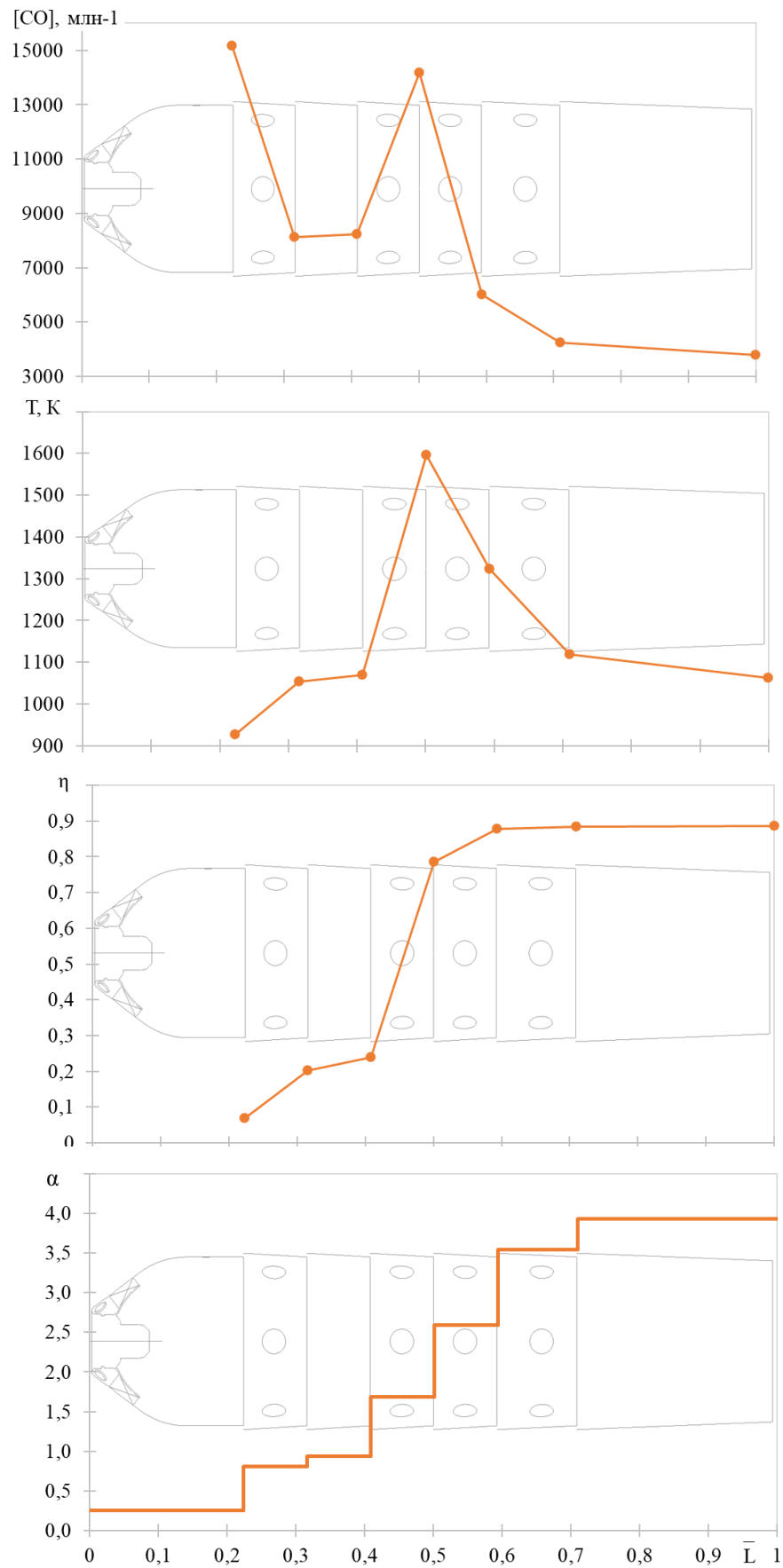
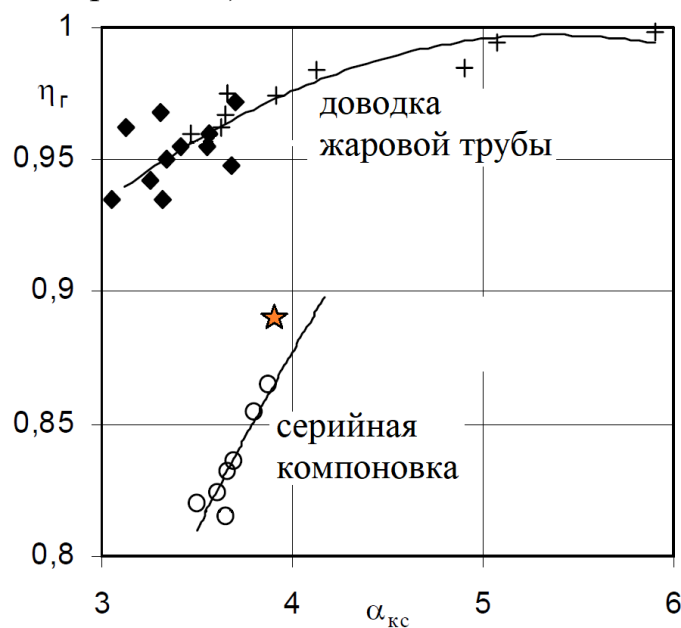


Рисунок 4.15 – Распределение параметров по длине жаровой трубы ($\alpha=3,93$)

Таблица 4.1 - Результаты расчета реакторной модели (серийная компоновка, режим $\alpha = 3,94$, $T_k=460$ К, $P^*_k=3,6$ бар, $\lambda_k=0,41$)

Зона	Реактор	Тип реактора	[CO], млн ⁻¹	[NO _x], млн ⁻¹	α	T, К	τ , мс	g(i)
фронтное устройство	ПЛ.І	PSR	$5,23 \cdot 10^4$	340	0,81	2172	1,56	0,0004
	БД.І		2363	147	2,30	1452	1,79	0,001
	ПЛ.ІІ		$5,19 \cdot 10^4$	343	0,81	2173	1,56	0,0229
	ОСН.І		$1,55 \cdot 10^4$	101	0,28	-	2,48	0,074
	ПЛ.ІІІ		$5,16 \cdot 10^4$	345	0,81	2174	1,56	0,0007
	ЗОТ		$1,11 \cdot 10^4$	67	0,02	-	83,9	0,002
секция 1	БД.1	PSR	7871	17	2,06	1488	1,0	0,09
	ОСН.1		8287	55	0,55	-	1,9	0,13
секция 2	БД.2	PSR	$1,26 \cdot 10^4$	18	2,03	1447	0,87	0,03
	ОСН.2	PFR	7705	38	0,88	1023	1,27	0,22
секция 3	БД.3	PSR	$1,04 \cdot 10^4$	18	1,97	1499	0,47	0,38
	ОСН.3	PSR	$3,77 \cdot 10^4$	340	0,88	2202	0,47	0,06
секция 4	ОСН.4	PSR	6023	44	2,59	1323	0,38	0,66
секция 5	ОСН.5	PSR	4238	32	3,56	1119	0,42	0,90
газосборник	ГС	PFR	3778	30	3,94	1062	0,98	1,0

По результатам расчетов получен высокий уровень выбросов СО на выходе из камеры сгорания, соответствующий полноте сгорания топлива $\eta = 0,89$. Это согласуется с экспериментом (рисунок 4.16 [37]), где полнота сгорания составила порядка $\eta \approx 0,87$ (отметим, что расчеты выполнены с условием подвода «чистого» воздуха в камеру сгорания, в экспериментах осуществлялся подогрев воздуха с помощью газового подогревателя).



★ - реакторная модель камеры сгорания

Рисунок 4.16 – Экспериментальная и расчетная полнота сгорания

Рассмотрим реакторную модель исходной камеры сгорания с позиции уменьшения выбросов СО и повышения полноты сгорания.

Во фронтальном устройстве и в секции 1 имеются зоны с чрезмерно «богатой» горючей смесью, что снижает эффективность процессов горения (см. реакторы ОСНІ и ОСНІ с $\alpha = 0,28-0,55$).

В секции 2 большей частью протекает газ с «богатым» ($\alpha < 1$) составом горючей смеси, что соответствует концепции «богато-бедной» малоэмиссионной камеры сгорания.

В секциях 3 и 4 подведено большое количество вторичного воздуха, что привело к чрезмерному «обеднению» горючей смеси и неэффективному использованию объемов этих зон.

В секции 5 и газосборнике камеры сгорания остатки вторичного воздуха смешиваются с газом, происходит медленное окисление СО в СО₂, процессы горения во многом завершены.

Таким образом, для повышения полноты сгорания и снижения выбросов СО исследуемой камеры сгорания необходимо улучшить процессы смешения и оптимизировать распределение воздуха по длине.

Для примера, введем некоторые изменения в распределение воздуха по длине и оценим их эффективность с помощью разработанной реакторной модели.

Перенаправим 20 % воздуха из секций 3 и 4 в секцию 5. Это уменьшит объем «бедной» струйки в секции 3 и несколько «обогастит» чрезмерно «бедную» ($\alpha = 2,59$) горючую смесь в секции 4, что должно привести к повышению полноты сгорания. Для этого в реакторной модели, помимо перераспределения расходов воздуха и газа, потребуются также корректировка объемов реакторов БДЗ и ОСНЗ (корректировка выполняется пропорционально изменению количества подводимого рабочего тела).

Результаты расчетов приведены в таблице 4.2 (зоны до секции 3 не показаны т.к. в них нет изменений). Видно, что расчетные выбросы СО значительно снизились (на 45 %).

Таблица 4.2 - Результаты расчета доработанной камеры сгорания (режим $\alpha = 3,94$, $T_K=460$ К, $P^*_K=3,6$ бар, $\lambda_K=0,41$)

Зона	Реактор	Тип реактора	[CO], млн ⁻¹	[NO _x], млн ⁻¹	α	T, К	τ , мс	g(i)
секция 3	БД.3	PSR	$1,097 \cdot 10^4$	18	1,98	1492	0,46	0,31
	ОСН.3	PSR	$3,74 \cdot 10^4$	349	0,88	2207	0,55	0,09
секция 4	ОСН.4	PSR	4176	71	2,26	1450	0,39	0,58
секция 5	ОСН.5	PSR	2368	46	3,56	1136	0,41	0,90
газосборник	ГС	PFR	2074	41	3,94	1077	0,96	1,0

Таким образом, разработанный метод применим в качестве инструмента для повышения полноты сгорания и снижения выбросов СО в комплексном процессе создания камер сгорания ГТД.

4.2.3 Результаты CFD моделирования конвертированной камеры сгорания

Трехмерная расчетная модель исследуемой конвертированной камеры сгорания приведена на рисунке 4.17.

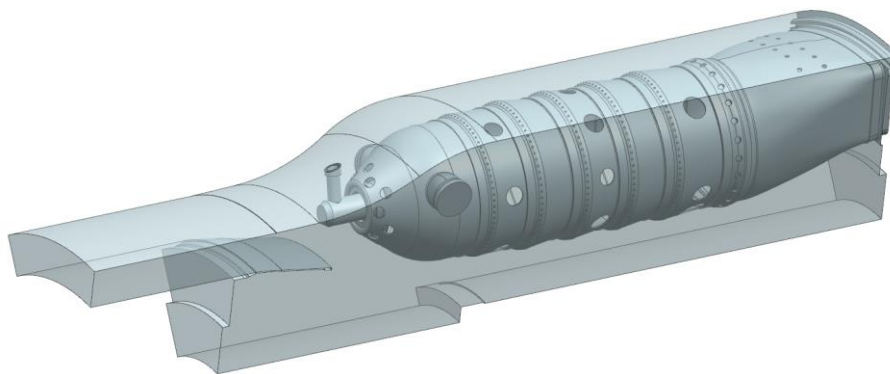


Рисунок 4.17 – Трехмерная расчетная модель исследуемой камеры сгорания

Трехмерное CFD моделирование выполнено в программном комплексе ANSYS CFX v.16.1.

Модель турбулентности - SST (Shear Stress Transport). Модель лучистого теплообмена - Discrete Transfer, спектральная модель – Weighted Sum of Gray Gases. Горение моделировалось с помощью модели EDM (Eddy Dissipation Model) и

глобального двухшагового механизма химической кинетики окисления метана [97].

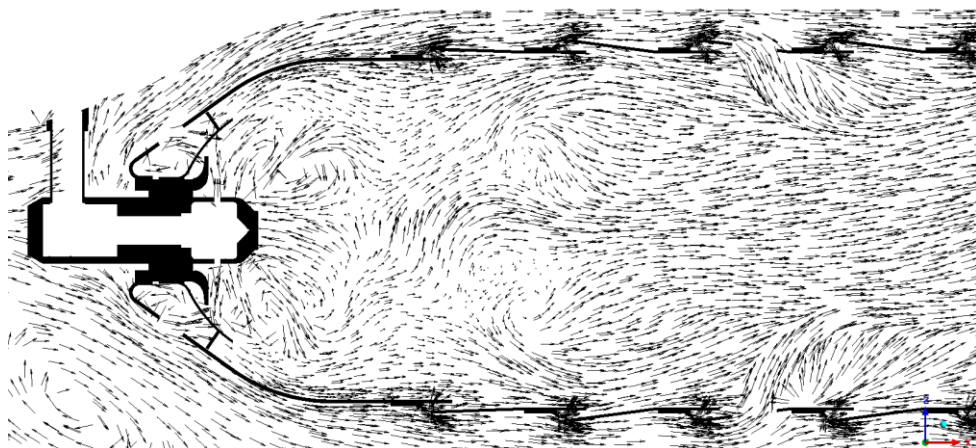
Тетраэдрическая расчетная сетка построена в ANSYS Meshing и состоит из 13,5 млн элементов.

Режимы работы камеры сгорания, для которых выполнено CFD моделирование, приведены в таблице 4.3.

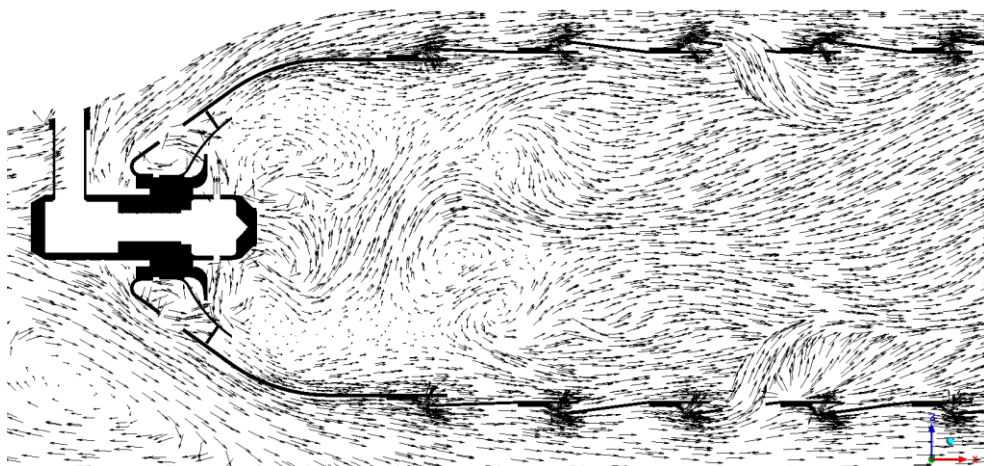
Таблица 4.3 – Расчетные режимы

Параметр	Значение			
$\alpha_{\text{КС}}$	2,7	3,93	4,81	5,47
$T_{\text{К}}^*$, К	469	460	463	453
$p_{\text{К}}^*$, МПа	0,515	0,398	0,471	0,375
$\lambda_{\text{К}}$	0,357	0,405	0,412	0,446

Расчетное распределение векторов скоростей и температуры газов на режимах $\alpha = 2,7$ и $\alpha = 5,5$ приведены на рисунках 4.18, 4.19 соответственно.



a



б

Рисунок 4.18 - Расчетное распределение векторов скоростей:

a – режим $\alpha = 2,7$; *б* – режим $\alpha = 5,5$

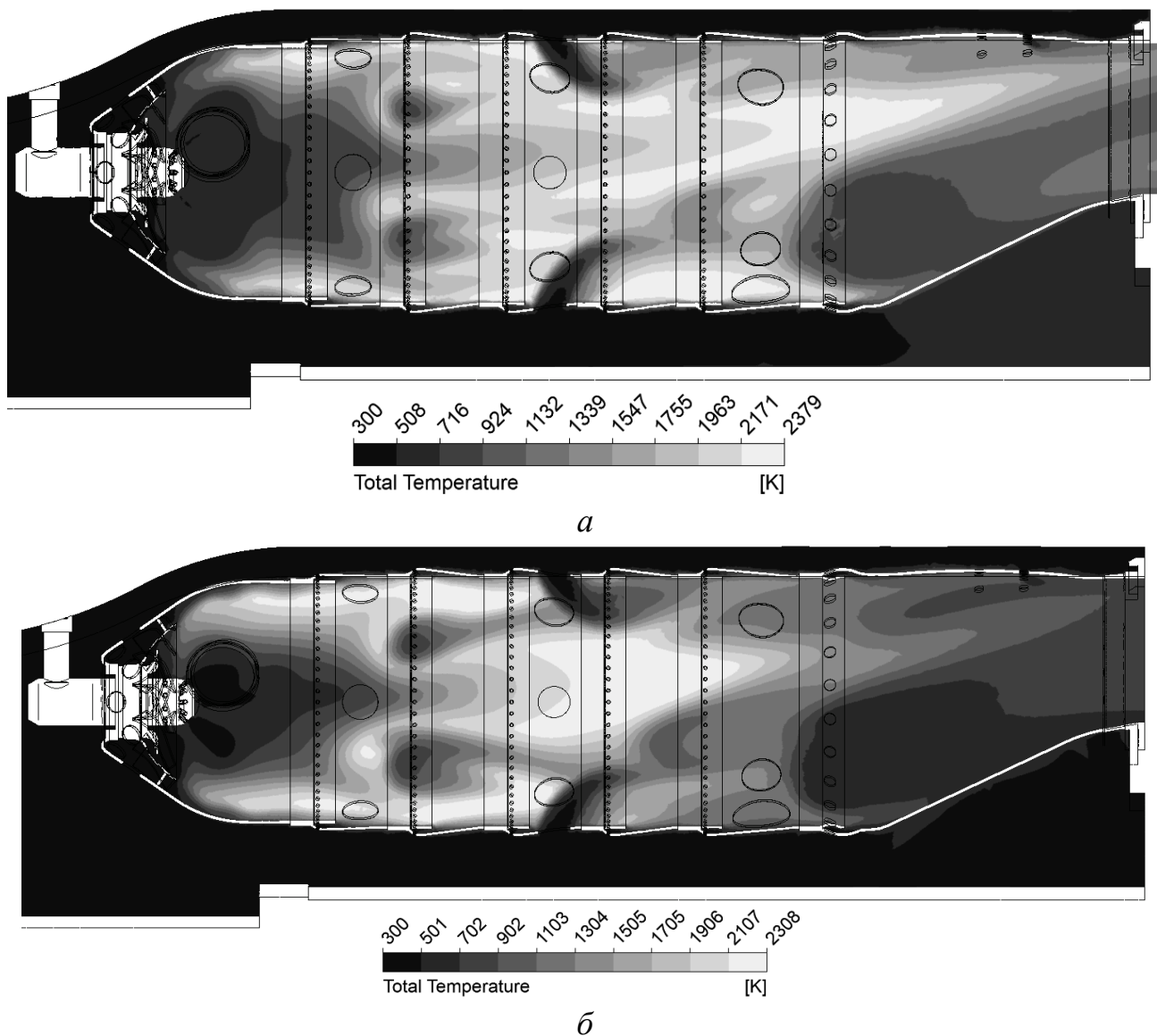


Рисунок 4.19 - Расчетное распределение температуры газов:
a – режим $\alpha = 2,7$; *б* – режим $\alpha = 5,5$

Из рисунков видно, что двукратное форсирование камеры сгорания с $\alpha=5,5$ до $\alpha=2,7$ привело к изменению структуры течения и горения газов в исследуемой камере сгорания.

Сравнение расчетных выбросов CO с результатами экспериментов приведено на рисунке 4.20. Из рисунка видно, что расчетные выбросы монооксида углерода не соответствуют экспериментальным. Это объясняется применением в CFD модели горения EDM с глобальным механизмом химической кинетики.

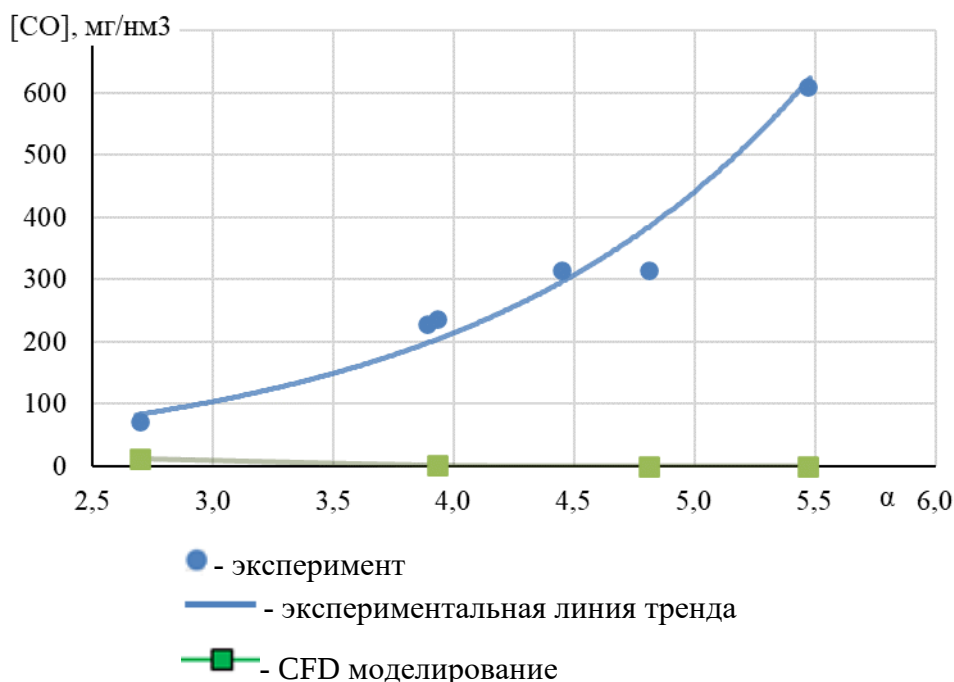


Рисунок 4.20 – Экспериментальные и расчетные (CFD) выбросы монооксида углерода из исследуемой камеры сгорания (при 15 % O_2 в «сухих» продуктах сгорания)

4.2.4 Реакторная модель камеры сгорания. Сравнение результатов расчета с экспериментом

Разработанные по предлагаемому методу реакторные модели конвертированной камеры сгорания приведены на рисунке 4.21.

Нужно отметить, что реакторные модели для «бедных» режимов ($\alpha = 3,9-5,5$) несколько отличаются от модели для «богатого» режима ($\alpha = 2,7$). Это связано с изменением структуры горения при двукратном уменьшении количества топлива во фронтном устройстве. Таким образом, соблюдение разработанных принципов построения реакторной модели приводит к изменению структуры реакторной модели при изменении структуры течения и распределения реагентов в камере сгорания.



a – расчетные сечения; *б* – режим $\alpha = 2,7$; *в* – режимы $\alpha = 3,9; 4,8; 5,5$

На схеме реакторы идеального смешения PSR обозначены окружностями, реакторы идеального вытеснения PFR прямоугольниками. Маркировки В и Т соответствуют подводам воздуха и топлива, ПЛ – зона пламени (зона пламени условно разделена на три зоны), БД – «бедная» струйка, БГ – «богатая» струйка (зона), ОСН – основной поток, ЗОТ – зона обратных токов, ГС – газосборник. В маркировках реакторов после точки указывается порядковый номер по

принадлежности к фронтовому устройству – римские цифры, либо по принадлежности к секциям жаровой трубы – арабские цифры.

Отметим некоторые особенности реакторных моделей:

- «бедная» струйка во фронтовом устройстве формируется газом от зоны пламени и воздухом;

- интенсивное смешение в секции 1 моделируются с допущением, что в первую очередь смешиваются струи газа за фронтовым устройством, затем происходит смешение газов с основным и охлаждающим воздухом;

- после подвода определенного количества основного воздуха «бедная» струйка вырождается и отдельно не моделируется – весь поток становится «бедным»;

- ввиду чрезмерно «богатой» смеси во фронтовом устройстве на режиме $\alpha = 2,7$ потребовалось отдельно моделировать «богатую» струйку БГ, исходя из устойчивого розжига реактора ОСН.1.

В реакторной модели допускается небольшое перераспределение расходов относительно исходного (полученного по результатам CFD моделирования) для поддержания горения в «бедных» струйках (реакторы моделирующие «бедные» струйки близки к границе срыва пламени). Так, на режимах $\alpha = 2,7$, $\alpha = 3,9$ и $\alpha = 5,5$ от реактора ОСН.1 отбирается небольшая часть газа в реактор БД.1 (не показано на схеме). При этом расход газа в «бедном» реакторе БД.1 от первоначального изменился незначительно – в пределах 0,7-2,8 %.

Также отдельного внимания требуют реакторы БД.4 (рис. 4.21б) и БД.2 (рис. 4.21в). Здесь сложная картина смешения – реакторы формируются тремя потоками: охлаждающий воздух; часть газа от предыдущей «бедной» струйки и часть газа от предыдущего основного потока. В реакторной модели потребовалась корректировка распределения расходов между тремя потоками относительно исходного, так чтобы выдержать требуемый состав газа в «бедной» струйке. При этом после корректировок расход газа в «бедных» струйках изменился не более чем на 10 %.

Таким образом, допускается локальная корректировка распределения расходов, при условии, что расход газа в «бедных» струйках изменяется не более чем $\sim 10\%$ от исходного и состав смеси соответствует $T = 1450 \pm 50$ К. Объемы «бедных» и основных струек (реакторов) – без изменений.

Расчеты реакторных моделей выполнены с применением детального механизма химической кинетики окисления метана GRI-Mech 3.0 (53 компонента и 325 реакций).

Результаты расчета реакторной модели на режимах $\alpha=2,7$ и $\alpha=5,5$ приведены в таблицах 4.4, 4.5.

Таблица 4.4 - Результаты расчета реакторной модели (режим $\alpha=2,7$, $T_k=469$ К, $P_k^* = 0,515$ МПа, $\lambda_k = 0,36$)

Зона	Реактор	Тип реактора	[CO], млн ⁻¹	[NOx], млн ⁻¹	α	T, К	τ , мс	g(i)
фронтное устройство	ПЛ.І	PSR	$5,92 \cdot 10^4$	176	0,78	2132	0,58	0,006
	БД.І		5002	101	2,33	1421	0,82	0,018
	ПЛ.ІІ		$5,93 \cdot 10^4$	183	0,78	2136	0,57	0,022
	ОСН.І		$1,52 \cdot 10^4$	47	0,19	825	1,2	0,080
	ПЛ.ІІІ		$5,91 \cdot 10^4$	177	0,78	2133	0,58	0,002
	ЗОТ		$2,5 \cdot 10^4$	73	0,06	-	35,0	0,004
	ОСН.ІІ		$6,97 \cdot 10^4$	39	0,68	2039	2,2	0,030
	БГ		$1,58 \cdot 10^4$	48	0,18	-	1,8	0,075
секция 1	БД.1	PSR	9989	14	2,05	1473	1,0	0,109
	ОСН.1		$1,93 \cdot 10^4$	30	0,43	933	1,5	0,153
секция 2	ОСН.2	PFR	$1,49 \cdot 10^4$	22	0,70	1114	1,3	0,274
секция 3	БД.3	PSR	$1,13 \cdot 10^4$	39	2,0	1486	0,5	0,335
	ОСН.3		$5,01 \cdot 10^4$	284	0,82	2179	0,35	0,203
секция 4	БД.4	PFR	1232	50	2,26	1486	0,53	0,111
	ОСН.4	PFR	449	181	1,27	2087	0,37	0,417
секция 5	ОСН.5	PSR	175	93	2,40	1442	0,41	0,885
газосборник	ГС	PFR	81	83	2,72	1345	0,96	1,000

Таблица 4.5 - Результаты расчета реакторной модели (режим $\alpha = 5,5$, $T_k=453$ К, $P_k^*=0,375$ МПа, $\lambda_k=0,45$)

Зона	Реактор	Тип реактора	[CO], млн ⁻¹	[NOx], млн ⁻¹	α	T, К	τ , мс	g(i)
фронтное устройство	ПЛ.I	PSR	$4,28 \cdot 10^4$	394	0,85	2191	1,1	0,008
	БД.I		$2,73 \cdot 10^3$	164	2,35	1425	1,36	0,022
	ПЛ.II		$4,32 \cdot 10^4$	393	0,85	2190	1,1	0,019
	ОСН.I		$4,66 \cdot 10^4$	381	0,83	2182	0,83	0,052
	ПЛ.III		$4,33 \cdot 10^4$	392	0,85	2189	1,1	0,006
	ЗОТ		$1,29 \cdot 10^4$	65	0,07	-	12,8	0,015
секция 1	БД.1	PSR	$1,26 \cdot 10^4$	67	2,13	1399	0,79	0,204
	ОСН.1		$5,74 \cdot 10^4$	80	0,55	1811	0,56	0,059
секция 2	БД.2	PSR	3593	65	2,27	1448	0,82	0,108
	ОСН.2	PFR	1539	151	1,17	2175	0,48	0,164
секция 3	ОСН.3	PSR	757	64	2,79	1306	0,45	0,513
секция 4	ОСН.4	PFR	552	61	2,89	1283	0,44	0,531
секция 5	ОСН.5	PSR	321	37	4,87	976	0,44	0,887
газосборник	ГС	PFR	279	33	5,50	921	1,02	1,000

Применительно к таблицам 4.4, 4.5 нужно отметить следующее:

- время пребывания горючей смеси τ рассчитано по плотности горячих продуктов сгорания;
- для реакторов типа PFR параметры [CO], [NOx] и T указаны на выходе из реактора;
- представлены результаты для «влажных» продуктов сгорания без приведения количества CO и NOx к стандартным 15 % O₂.

По результатам расчетов видно, что основным источником CO, в зонах близких к завершению горения, являются «бедные» струйки ТВС (см. секцию 4 на режиме $\alpha=2,7$ и секцию 2 на режиме $\alpha=5,5$).

Распределение параметров по длине жаровой трубы по результатам расчета реакторных моделей и CFD моделирования приведено на рисунках 4.22 и 4.23. Осреднение выполнено по массовому расходу (параметры неравномерно распределены по сечениям). Распределение коэффициентов избытка воздуха α по реакторной модели соответствует распределению по CFD моделированию.

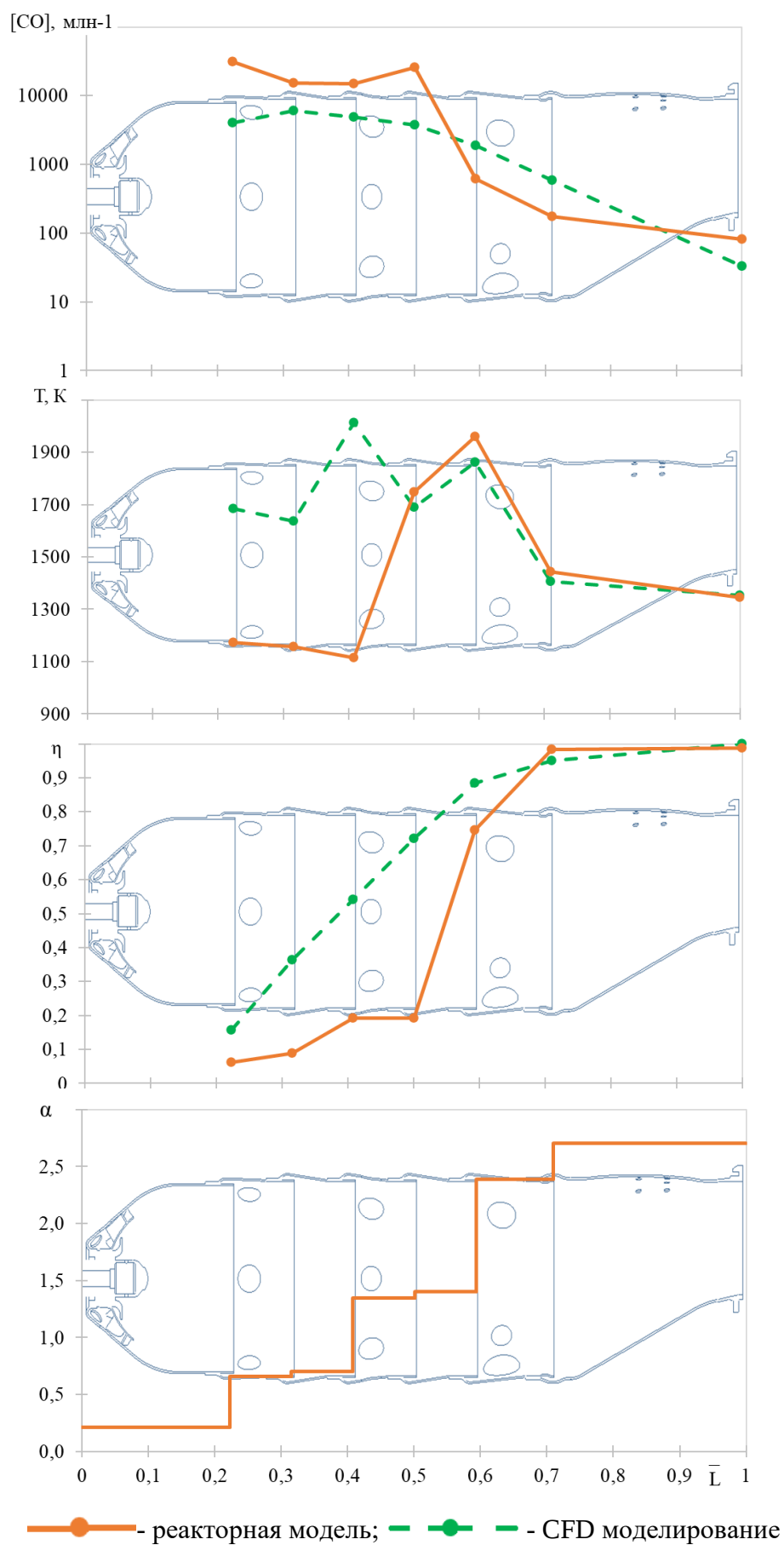


Рисунок 4.22 – Распределение параметров по длине жаровой трубы ($\alpha=2,7$)

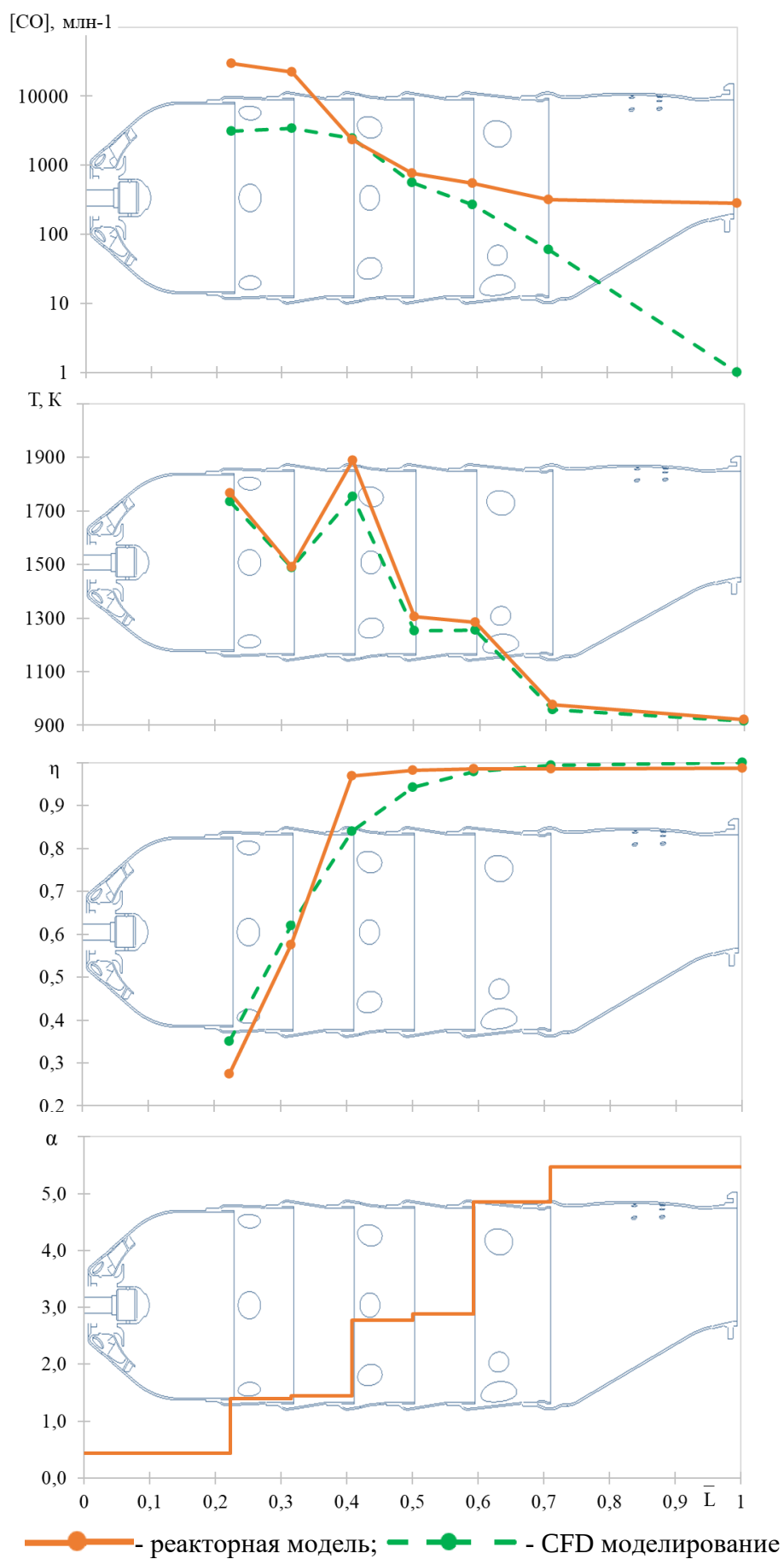


Рисунок 4.23 – Распределение параметров по длине жаровой трубы ($\alpha=5,5$)

Отметим более высокую полноту сгорания и низкие уровни выброса CO в CFD моделировании по сравнению с расчетом по реакторной модели. Это вызвано лимитированием скорости горения процессами смешения и применением глобальной химической кинетики в CFD модели горения EDM.

Сравнение результатов расчета с экспериментом приведено на рисунке 4.24. Построенная, по предлагаемому методу, расчетная зависимость выбросов CO от режима работы камеры сгорания согласуется с экспериментальной. Например, по результатам измерений и расчетов получено, что выбросы CO из исследуемой камеры сгорания превышают 300 мг/нм³ (ограничение по ГОСТ 28775) на режимах с $\alpha \approx 4,4$ и более. При сопоставлении расчетов с экспериментом непосредственно в точках измерений различие составило в среднем 13,1 % в диапазоне по составу смеси $\alpha=2,7-5,5$ (экспериментальная точка на режиме $\alpha \approx 4,8$ принята выпавшей). Таким образом, получено хорошее соответствие расчётных и экспериментальных выбросов CO.

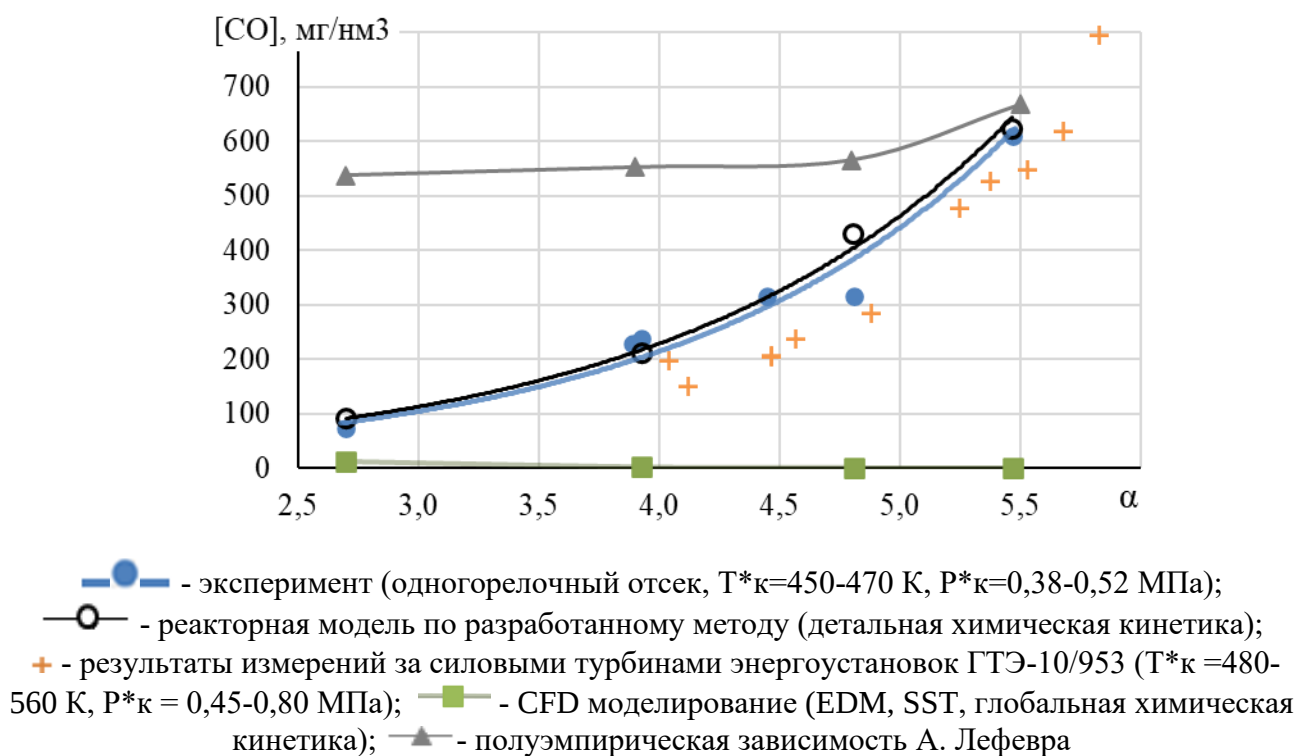


Рисунок 4.24 - Экспериментальная и расчетная зависимости выбросов монооксида углерода от суммарного коэффициента избытка воздуха камеры сгорания (при 15 % O₂ в «сухих» продуктах сгорания)

Из рисунка 4.24 также видно, что расчётные выбросы СО полученные по CFD с моделью горения EDM не согласуются с экспериментом, что объясняется применением упрощенного глобального механизма химической кинетики. Полуэмпирическая модель А. Лефевра позволила корректно оценить максимальный уровень выбросов СО на режиме $\alpha \approx 5,5$, однако при $\alpha < 5,0$ расчётные выбросы СО существенно расходятся с экспериментом.

Дополнительно, на рисунке 4.24, приведены результаты измерений выбросов СО за силовой турбиной энергоустановок ГТЭ-10/953 в ходе эксплуатации [48]. Количество СО отличается от измеренных на одnogорелочном отсеке, что вызвано ограничением по максимальной температуре подогрева воздуха на стенде испытаний камер сгорания.

Выводы к четвертой главе

1 Выполнена апробация разработанного метода на примере расчета выбросов СО из одnogорелочного отсека «богато-бедной» малоэмиссионной камеры сгорания наземной газотурбинной энергоустановки ГТЭ-10/953, конвертированной из авиационного двигателя типа Р-95Ш. По результатам расчетов получены данные с распределением параметров и количества вредных веществ в элементах реакторной модели камеры сгорания для рабочего диапазона по α .

2 Расчетная зависимость выбросов СО от коэффициента избытка воздуха согласуется с экспериментальной и позволяет определить режим, на котором выбросы СО начинают превышать заданные ограничения. По результатам измерений и расчетов получено, что выбросы СО из исследуемой конвертированной камеры сгорания превышают 300 мг/нм³ (ограничение по ГОСТ 28775) на режимах с $\alpha \approx 4,4$ и более. При сопоставлении расчетов с экспериментом непосредственно в точках измерений различие составило в среднем 13,1 %.

3 В рамках разработанного метода структура реакторной модели изменяется при изменении структуры течения и распределения топлива в камере сгорания.

Например, в расчетах камеры сгорания ГТЭ-10/953 реакторные модели для относительно «бедных» режимов ($\alpha = 3,9-5,5$) отличаются от модели для «богатого» режима ($\alpha = 2,7$), что связано с изменением количества топлива, подводимого во фронтное устройство.

4 По разработанному методу выполнена расчетная оценка выбросов СО и полноты сгорания топлива исходной камеры сгорания - распределение воздуха по длине жаровой трубы соответствует серийной камере сгорания авиационного двигателя типа Р-95Ш, керосиновая форсунка заменена на газовую. Получен высокий уровень СО и низкая полнота сгорания ($\eta_p \approx 0,89$), что соответствует экспериментальным данным ($\eta_p \approx 0,87$). Таким образом, показана возможность применения разработанного метода на этапе доводки конвертированных камер сгорания.

5 Расчеты реакторных моделей камеры сгорания выполнены в некоммерческом программном продукте CANTERA с открытым исходным кодом (независимый от импорта программный продукт). Для осуществления расчетов был разработан программный код с вызовом из стандартных библиотек подпрограмм расчета задач термохимии. Программный код уникален для каждой реакторной модели. Таким образом, в рамках оценки выбросов СО из камер сгорания ГТД по разработанному методу, была также отработана соответствующая вычислительная технология.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенных исследований решена актуальная научная задача по повышению эффективности проектирования камер сгорания ГТД, работающих на природном газе, за счёт улучшения точности расчёта выбросов монооксида углерода (CO) по реакторной модели камеры сгорания, построенной на базе результатов трёхмерного моделирования с применением экономичных, с позиции вычислительных затрат, моделей горения и турбулентности.

В процессе работы получены следующие результаты:

1 Разработан новый метод расчёта выбросов монооксида углерода (CO) с формализованным выделением зон, лимитирующих его окисление в камерах сгорания ГТД, применение которого в среднем уменьшает погрешность прогнозирования зависимости выбросов CO от коэффициента избытка воздуха с 40-100 % до 13 % при применении RANS моделей турбулентности, которые на порядок экономичнее нестационарных URANS (Unsteady RANS) моделей и в 100-1000 раз экономичнее LES (Large Eddy Simulation) моделей турбулентности.

2 Разработан критерий формирования реакторной модели камеры сгорания, отличающийся обобщением «бедных» зон, неравномерно распределённых в рабочем объёме, в «бедные» струйки с составом смеси с адиабатической температурой $T_{adia} = 1450 \pm 50$ К. Критерий разработан на основании расчётов характеристик пламён с детальной химической кинетикой и данных из литературы, согласно которым высокое содержание CO в продуктах сгорания метано-воздушных смесей соответствует температуре менее 1400 К.

3 Разработан критерий моделирования реакторами зоны пламени, отличающийся выделением зоны с температурой $T_{adia} > 1900$ К. По результатам анализа характеристик пламён получено, что при достижении температуры 1900 К и более существенен сдвиг равновесия в сторону CO (существенна диссоциация CO_2 в CO) в исследованном диапазоне давления 0,5-10,0 МПа.

4 Выполнена апробация разработанного метода на примере расчёта выбросов CO из одногогорелочного отсека «богато-бедной» малоэмиссионной камеры

сгорания наземной газотурбинной энергоустановки ГТЭ-10/953, конвертированной из авиационного двигателя типа Р-95Ш. Расчётная зависимость выбросов СО от коэффициента избытка воздуха согласуется с экспериментальной и позволяет определить режим, на котором выбросы СО начинают превышать заданные ограничения. При сопоставлении расчётов с экспериментом непосредственно в точках измерений различие составило в среднем 13,1 %.

Расчёты реакторных моделей камеры сгорания выполнены с применением детального механизма химической кинетики окисления природного газа GRI-Mech 3.0 (53 компонента и 325 реакций) в некоммерческом программном продукте CANTERA с открытым исходным кодом (независимый от импорта программный продукт) для чего был разработан специальный программный код и отработана соответствующая вычислительная технология.

Материалы исследования применялись в ОКБ «Мотор» ПАО «ОДК-УМПО» при расчётных исследованиях камеры сгорания ГТЭ-10/953 и разработке технического предложения для газотурбинной энергетической установки ГТУ-2У, а также в ООО «НПФ «Теплофизика» при исследовании рабочих процессов малоэмиссионных камер сгорания газотурбинных газоперекачивающих агрегатов ГТК-10ИР, ГТК-25ИР и ДГ-90.

Перспектива дальнейшего развития работы состоит в апробации и адаптации метода для расчёта камер сгорания авиационных и наземных ГТД при работе на различного рода топливах (синтез-газ, дизельное топливо и др.).

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

- АД – авиационный двигатель;
- ГТД – газотурбинный двигатель;
- ГТУ – газотурбинная установка;
- ГТЭУ – газотурбинная энергетическая установка;
- ГПА – газоперекачивающий агрегат с газотурбинным приводом;
- ЗОТ – зона обратных токов;
- ТВС – топливовоздушная смесь;
- ПК – программный комплекс;
- BTU - British thermal unit (британская термическая единица);
- CFD – Computational Fluid Dynamics;
- DES – Detached Eddy Simulation;
- DT – Discrete Transfer;
- DNS – Direct Numerical Simulation;
- EDM – Eddy Dissipation Model;
- EDC – Eddy Dissipation Concept;
- FRC – Finite Rate Chemistry;
- LES – Large Eddy Simulation;
- PDF – Probability Density Function;
- PSR – Perfectly Stirred Reactor;
- PaSR – Partially Stirred Reactor;
- PFR – Plug Flow Reactor;
- RANS - Reynolds-averaged Navier-Stokes;
- RQL – Rich-Quench-Lean;
- SST - Shear Stress Transport;
- WSGG – Weighted Sum of Gray Gases;
-
- CO – монооксид углерода (оксид углерода);
- CO₂ – углекислый газ (диоксид углерода);

NO_x – оксиды азота;

SO_x – оксиды серы;

uCH - углеводороды (несгоревшие);

A – предэкспоненциальный фактор, площадь;

B – эмпирический коэффициент;

C_i – эмпирические коэффициенты;

D – диаметр;

d_3 – диаметр экрана аэрационного насадка;

E – энергия активации;

e_i - эмпирические коэффициенты;

F – площадь;

$F_{\text{ж}}$ – площадь поперечного сечения жаровой трубы;

F_3 – площадь сечения завихрителя;

G – массовый расход;

$g(i)$ – массовая доля i -го компонента;

h – энтальпия;

I – интенсивность излучения;

i_i - эмпирические коэффициенты;

K – коэффициент поглощения;

k – кинетическая энергия; коэффициент теплопередачи;

L – длина;

$\dot{m}$ - массовый расход;

$\dot{m}_a$ - расход воздуха в камере сгорания;

m – масса;

N – количество;

p – давление;

pz – primary zone (первичная зона);

q_w – удельный тепловой поток;

$\dot{Q}$ - тепловой поток;

R – газовая постоянная;

s – расстояние;

t_n – температура окружающей среды;

T – температура;

T_{adia} – адиабатическая температура;

$T_{исх}$ – температура исходной горючей смеси;

$T_{w\ gas}$ – температура газа в пристеночной области;

u – осевая составляющая скорости;

V – скорость; объем;

V_c – объем зоны горения;

V_e – объем, необходимый для испарения топлива;

V_L – скорость распространения ламинарного фронта пламени;

$V_{ж}$ – объем жаровой трубы;

W – скорость;

$\overline{W}$ – интенсивность крутки завихрителя;

Y_{plus} – безразмерное расстояние от стенки;

Z – переменная смешения Z (mixture fraction);

Z'^2 – дисперсия переменной смешения;

$*$ – параметры заторможенного потока;

z – завихритель;

k – параметры на входе в камеру сгорания;

w – стенка;

$\sum \mu F_{ож}$ – суммарная эффективная площадь поступления воздуха в жаровую трубу;

α – коэффициент избытка воздуха; коэффициент теплоотдачи;

δ – толщина стенки; разница;

ε – диссипация кинетической энергии; степень черноты;

π_k – степень повышения давления в компрессоре;

η_r – коэффициент полноты сгорания топлива;

ρ – плотность;

λ – коэффициент теплопроводности;

μF_3 – эффективная площадь сечения завихрителя;

ν – кинематическая вязкость;

τ – время;

φ – коэффициент избытка топлива;

χ – скорость диссипации скаляра; массовое отношение топливо/воздух;

$\dot{\omega}_i$ – объемная скорость образования i -го компонента;

$[i]$ – объемная доля i -го компонента;

$[i]_{\text{равн}}$ – равновесное значение объемной доли i -го компонента.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абугов, Д. И. Основы теории горения / Д. И. Абугов – М.: МАИ, 1958. – 72 с.
2. Апробация методики расчета выбросов монооксида углерода из камер сгорания ГТД по реакторной модели с отслеживанием «бедных» струек топливовоздушной смеси / А.Р. Кутлумухамедов, Д.В. Скиба, Г.П. Гребенюк, Ф.Г. Бакиров // Вестник УГАТУ. – 2022. – Т. 26, № 2 (96). – С. 82-92.
3. Болдырев, О.И. Влияние термической диссоциации продуктов сгорания углеводородного топлива на параметры рабочего процесса перспективных ГТД : специальность 05.07.05 Тепловые, электроракетные двигатели и энергетические установки летательных аппаратов : автореф. дисс. на соиск. уч. ст. канд. техн. наук. – Уфа, 2012. – 16 с. - Место защиты: Уфим. гос. авиац.-техн. ун-т.
4. Болдырев, О.И. Оценка основных параметров ГТД с применением методики моделирования равновесного состояния гомогенной смеси продуктов сгорания углеводородного топлива / О.И. Болдырев, И.М. Горюнов // Вестник СГАУ. – 2011. – № 3 (27) – С. 308-313.
5. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / Пер. с англ. Г.Л. Агафонова. Под ред. П.А. Власова. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003.-352 с. - ISBN 5-9221-0438-1.
6. Волков С.А., Действующие и планируемые международные требования к ГТД по ограничению эмиссии вредных веществ / С.А. Волков, Е.Б. Жесткова // Авиадвигатели XXI века: материалы всероссийской науч. – техн. конф. – Москва, ЦИАМ, 2015, - С. 395-397.
7. Диденко, А.А. Теория и расчет камер сгорания ВРД. Часть II. Оценка экологических характеристик показателей камер сгорания ГТД: учеб. пособие для курсового и дипломного проектирования / А.А. Диденко – Самара: Изд-во СГАУ, 2012. – 54 с.

8. Дейч, М.Е. Техническая газодинамика / М.Е. Дейч – М.: «Энергия», 1974. – 592 с.
9. Жестков, Б.А. Основы теории и расчета теплового состояния стенок камер сгорания реактивных двигателей: учеб. пособие / Б.А. Жестков ; Уфимск. авиац. инст. – Уфа: УАИ, 1980. - 94 с.
10. Ивах, А.Ф. Результаты исследований влияния особенностей процессов смесеобразования и горения на генерацию NO_x в однозонной камере сгорания при «бедной» и «богато-бедной» схемах горения / А.Ф.Ивах, Г.П. Гребенюк, Н.И. Фокин // Труды V Всеросс. НТК «Процессы горения, теплообмена и экологии тепловых двигателей».- Самара, 2004.
11. Кашапов, Р.С. Экспериментальное и теоретическое исследование образования окислов азота при горении однородной метановоздушной смеси / Р.С. Кашапов, Д.А. Максимов, Д.В. Скиба // Изв. вузов. Авиационная техника. - 1999. -№ 3.
12. Кофман, В.М. Математическая модель расчета теплового состояния кольцевых камер сгорания ГТД / В.М. Кофман // Вестник УГАТУ. – 2013. - Т.17, №1 (54) – С. 10-20.
13. Кутлумухамедов, А.Р. Расчет процессов горения метана в КС ГТД наземного применения // Материалы V Всероссийской НТК молодых специалистов. – Уфа: ОАО «УМПО», 2011.
14. Кутлумухамедов, А.Р. Опыт эволюционной доводки авиационной камеры сгорания, предназначенной для работы в составе наземной энергетической установки / А.Р. Кутлумухамедов, Д.В. Морозов, Н.И. Фокин // Авиадвигатели XXI века: материалы всероссийской науч.-техн. конф. – Москва: ЦИАМ, 2015.
15. Кутлумухамедов, А.Р. Некоторые проблемы снижения выбросов монооксида углерода в малоэмиссионных камерах сгорания с предварительным смешением топлива / А.Р. Кутлумухамедов, Д.В. Скиба, Ф.Г. Бакиров // Науч.-техн. проблемы современного двигателестроения: материалы Всероссийской науч.-техн. конф. / Уфимск. гос. авиац. техн. ун-т. – Уфа: РИК УГАТУ, 2016 – С. 243-246.

16. Кутлумухамедов, А.Р. Трудности численного моделирования процессов горения в пристеночной области камер сгорания / А. Р. Кутлумухамедов, Д. В. Скиба, Ф. Г. Бакиров // Актуальные проблемы науки и техники: материалы X Всероссийской зимней школы-семинара аспирантов и молодых ученых: том 2 / Уфимск. гос. авиац. техн. ун-т. – Уфа: РИК УГАТУ, 2017 – С. 123-126.

17. Кутлумухамедов, А.Р. Расчет концентраций монооксида углерода на выходе из камеры сгорания с предварительным смешением топлива с помощью комбинированного метода // Сборник тезисов IX всероссийской научно-технической конференции молодых специалистов / Уфимск. моторостр. произ. объединен. – Уфа: ПАО «ОДК-УМПО», 2018 – С. 58-59.

18. Кутлумухамедов, А.Р. Расчетная оценка концентраций монооксида углерода на выходе из малоэмиссионной камеры сгорания с помощью комбинированного метода / А. Р. Кутлумухамедов, Д. В. Скиба, Ф. Г. Бакиров // Проблемы и перспективы развития двигателестроения: материалы докладов междунар. науч.-техн. конф. – Самара: Самарский университет, 2018 – С. 87-88.

19. Кутлумухамедов, А. Р. Расчетное исследование влияния отдельных факторов на уровень выбросов монооксида углерода с помощью реакторной модели малоэмиссионной камеры сгорания / А. Р. Кутлумухамедов, Д. В. Скиба, Ф. Г. Бакиров // Вестник УГАТУ. – 2019. – Т. 23, № 4 (86). – С. 84-92.

20. Кутлумухамедов, А.Р. Апробация комбинированного метода расчета концентраций монооксида углерода на выходе из камер сгорания ГТД / А. Р. Кутлумухамедов, Д. В. Скиба, Ф. Г. Бакиров // Молодежный Вестник УГАТУ. – 2019. – № 2 (21). – С. 72-75.

21. Кутлумухамедов А.Р. Комбинированный метод расчета концентраций монооксида углерода на выходе из камер сгорания газотурбинных двигателей: НКР. - Уфа: ФГБОУ ВО «УГАТУ», 2019. - с. 74.

22. Кутлумухамедов, А.Р. Разработка реакторной модели камеры сгорания с отслеживанием «бедной» струйки топливовоздушной смеси для расчета выбросов монооксида углерода / А. Р. Кутлумухамедов, Д. В. Скиба, Ф. Г. Бакиров // Молодежный Вестник УГАТУ. – 2020. – № 2 (23). – С. 72-75.

23. Кутлумухамедов, А.Р. Комбинированный метод расчета выбросов монооксида углерода из камер сгорания газотурбинных двигателей / А. Р. Кутлумухамедов, Д. В. Скиба, Ф. Г. Бакиров // Проблемы и перспективы развития двигателестроения: материалы докладов междунар. науч.-техн. конф. Т.2. - Самара: Самарский университет, 2021 – С. 132-133.

24. Кутлумухамедов, А. Р. Обзор работ, посвященных оценке выбросов монооксида углерода из камер сгорания газотурбинных двигателей по реакторной модели, разработанной на базе результатов трехмерного моделирования / А. Р. Кутлумухамедов, Д. В. Скиба, Ф. Г. Бакиров // Вестник УГАТУ. – 2022. – Т.26, № 1 (95). – С. 69-80.

25. Куценко, Ю.Г. Численные методы оценки эмиссионных характеристик камер сгорания газотурбинных двигателей. - Екатеринбург-Пермь: УрО РАН, 2006. - ISBN 5-7691-1770-2.

26. Лефевр, А. Процессы в камерах сгорания ГТД: Пер. с англ. / А. Лефевр – М.: Мир, 1986. – 566 с.

27. Матвеев, С.С. Методика определения эмиссии оксидов углерода камерами сгорания газотурбинных двигателей с использованием детальной химической кинетики окисления суррогатов керосина : специальность 05.07.05 Тепловые, электроракетные двигатели и энергетические установки летательных аппаратов : дисс. на соиск. уч. ст. канд. техн. наук. – Самара, 2017 . – Место защиты: Самарский университет.

28. Международные стандарты и рекомендуемая практика «Охрана окружающей среды». Приложение 16 к Конвенции о международной ГА. Том 2. Эмиссия авиационных двигателей / Международная организация гражданской. - 3-е изд. - 2008. - 115 с.

29. Мингазов, Б.Г. Камеры сгорания газотурбинных двигателей. Конструкция, моделирование процессов и расчет: Учебное пособие. Издание второе, исправленное. - Казань: Изд-во Казан. гос. техн. ун-та, 2006. - 220 с.

30. Михеев, М.А. Основы теплопередачи / М.А. Михеев, И.М. Михеева – 2-е издание, стереотип. – М.: Энергия, 1977. – 344 с.

31. Моделирование эмиссии монооксида углерода при горении жидкого топлива, распыляемого центробежной форсункой в камере сгорания / Н.И. Гураков, И.А. Зубрилин, О.В. Коломзаров [и др.] // Физика горения и взрыва. – 2023. - Т. 59 № 2. - С. 63-68.
32. Моделирование эмиссии токсичных веществ из камеры сгорания стационарной газотурбинной установки / И.А. Заев, Б.В. Потапкин, С.А. Федоров, В.В. Куприк // Изв. Вузов. Авиационная техника. - 2014. - № 2.
33. Нащокин, В.В. Техническая термодинамика и теплопередача. Учебн. пособие для неэнергетических специальностей вузов / Нащокин В.В. - 2-е издание, перераб. и доп. - М.: Высшая школа, 1975. - 496 с.
34. Никущенко, Д. В. Применение расчетного комплекса FLUENT для моделирования течений вязкой несжимаемой жидкости: Учеб. пособие. - СПб.: Изд. СПбГМТУ, 2005. - 97 с.
35. Орлов, М.Б. Моделирование процессов в камере сгорания / М.Ю. Орлов, С.В. Лукачёв, С.Г. Матвеев. – Самара: Изд-во Самарского университета, 2017. – 292 с.
36. Основы практической теории горения: Учебное пособие для вузов / В.В. Померанцев, К.М. Арефьев, Д.Б. Ахмедов [и др.] ; Под ред. В.В. Померанцева. 2-е изд., перераб. и доп. - Л.: Энергоатомиздат. Ленингр. отд-ние, 1986. - 312 с.
37. Особенности конвертирования форсированной по скорости камеры сгорания при работе на природном газе / А.Ф. Ивах, Г.П. Гребенюк, М.Н. Ишбулатов [и др.] // Вестник СГАУ им. акад. С. П. Королева: Материалы IV Всеросс. научно-практ. конф. "Процессы горения, теплообмена и экология тепловых двигателей". - Самара, 2002. - С. 21-26.
38. Патанкар, С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости: пер. с англ. под ред. В.Д. Виленского / С. Патанкар. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 124 с.
39. Постников, А.М. Снижение оксидов азота в выхлопных газах ГТУ / А.М. Постников; под ред. Е. А. Гриценко – Самара: Издательство Самарского научного центра РАН, 2002. - 286 с.

40. Пчелкин, Ю.М. Камеры сгорания газотурбинных двигателей: Учебник для студентов вузов, обучающихся по специальности "Турбиностроение" / Ю. М. Пчелкин. – 3-е изд., перераб. и доп. – М. : Машиностроение, 1984. – 280 с.

41. Пчеляков, А.А. Доводка малоэмиссионной камеры сгорания на ресурс / А.А. Пчеляков, В.Е. Николаев, В.Н. Лавров // Авиадвигатели XXI века: материалы всероссийской науч. - техн. конф. – Москва: ЦИАМ, 2015. - С. 457.

42. Разработка системы низкоэмиссионного горения топлива в газотурбинных установках / В. Н. Лавров, А.М. Постников, Ю. И. Цыбизов [и др.] // Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета. – 2007. - № 2.- С. 118-127.

43. Результаты испытаний жаровой трубы 953.03.2.2000 в составе одногорелочного отсека 006.97.979 на стендах ФГУП «НПП «Мотор» и ОАО «Авиадвигатель» /Техн. справка 953ДС-071 ФГУП «НПП «Мотор». – Уфа: НПП «Мотор», 2002.

44. Результаты испытаний жаровой трубы 953.03.2.2100 камеры сгорания двигателя ГТП-10/953 в одногорелочном отсеке на стенде ОАО «Авиадвигатель» / Технический отчет № 37618 ОАО «Авиадвигатель». – Пермь: ОАО «Авиадвигатель», 2002.

45. Разработка реакторных моделей диффузионной камеры сгорания для сравнительного анализа детальных и редуцированных кинетических схем горения углеводородных топлив / В. М. Захаров, В. Е. Козлов, А. Б. Лебедев [и др.] // Физика горения и взрыва. - 2009. - Т. 45, № 2. - С. 20-28.

46. Семенихин, А.С. Метод расчета эмиссии канцерогенных полициклических ароматических углеводородов камерами сгорания авиационных газотурбинных двигателей : специальность 05.07.05 Тепловые, электроракетные двигатели и энергетические установки летательных аппаратов : дисс. на соиск. уч. ст. канд. техн. наук. – Самара, 2022 . – Место защиты: Самарский университет.

47. Сергель, О.С. Прикладная гидрогазодинамика: Учебник для авиационных вузов. – М.: Машиностроение, 1981. – 374 с.

48. Содержание оксидов азота в отработавших газах ГТП-10/953 / Техн. справка 953ДС-175 ФГУП «НПП «Мотор». – Уфа: НПП «Мотор», 2007.
49. Сударев, А.В., Антоновский В.И. Камеры сгорания газотурбинных установок: Теплообмен. / А.В. Сударев, В.И. Антоновский – Л.: Машиностроение, Ленингр. отд-ние, 1985. – 272 с.
50. Сулимов, Д.Д. ГТУ ОАО «Авиадвигатель» для работы на синтез-газе, полученном в результате газификации угля / Д.Д. Сулимов // Материалы LVI науч.-техн. сессии по проблемам газовых турбин «Применение ГТУ в энергетике и промышленности». – Пермь, 2009 – С. 154-158.
51. Теория камеры сгорания / А.В. Григорьев, В.А. Митрофанов, О.А. Рудаков, Н.Д. Саливон ; под ред. О.А. Рудакова. - СПб.: Наука, 2010. - 228 с.
52. Федорченко, Д.Г. Опыт и перспективы использования криогенных и газокompозитных топлив / Д.Г. Федорченко, Ю.И. Цыбизов, И.Е. Воротынцев // Авиационные двигатели. – 2023. – № 2 (19) . – С.43-50.
53. Харитонов, В. Ф. Проектирование камер сгорания: учеб. пособие / В.Ф. Харитонов; Уфимск. гос. авиац. техн. ун-т. - Уфа: УГАТУ, 2008. - 138 с. - ISBN 978-5-86911-805-9.
54. Чечет, И.В. Методика определения эмиссии канцерогенных ароматических углеводородов камерами сгорания газотурбинных двигателей и установок : специальность 05.07.05 Тепловые, электроракетные двигатели и энергетические установки летательных аппаратов : дисс. на соиск. уч. ст. канд. техн. наук. – Самара, 2018 . – Место защиты: Самарский университет.
55. Щетинков, Е.С. Физика горения газов / Е.С. Щетинков .- М.: Наука, 1965. - 740 с.
56. Юн, А.А. Расчет и моделирование турбулентных течений с теплообменом, смешением, химическими реакциями и двухфазных течений в программном комплексе Fastest-3D: Учебное пособие. / А.А. Юн, Б.А. Крылов. - М.: Изд-во МАИ, 2007.-116 с. - ISBN 978-5-7035-1854-0.
57. ANSYS Chemkin-Pro Theory Manual. Ansys Chemkin-Pro Release 2019 R1. Ansys Europe, Ltd.

58. ANSYS CFX – Solver Theory Guide. Ansys CFX Release 2019 R1. Ansys Europe, Ltd.
59. ANSYS Fluent Theory Guide. Ansys Fluent Release 2019 R1. Ansys Europe, Ltd.
60. BFER global mechanism URL
<https://cerfacs.fr/cantera/mechanisms/meth.php#bfer>
61. Bengtsson K. U. M. NyOx Formation in Lean Premixed Combustion of Methane in a High-Pressure Jet-Stirred Reactor / K. U. M. Bengtsson, P. Benz , R. Schaeren and C. E. Frouzakis // Proc. Combust. Inst., 27, pp. 1393-1401.
62. Bramlette R.B., Depcik C.D. Review of propane-air chemical kinetic mechanisms for a unique jet propulsion application // Journal of the Energy Institute.
<https://doi.org/10.1016/j.joei.2019.07.010>
63. CANTERA URL <https://cantera.org>.
64. Correa S.M. Carbon Monoxide Emission in Lean Premixed Combustion // Journal of Propulsion and Power. Vol. 8, No. 6. Nov.-Dec. 1992 [S.M. Correa, “Carbon Monoxide Emission in Lean Premixed Combustion”, in Journal of Propulsion and Power, vol. 8, No. 6. 1992].
65. Dagaut P., Cathonnet M. The ignition, oxidation, and combustion of kerosine: A review of experimental and kinetic modeling. Progress in Energy and Combustion Science 32, 2006, 48-92
66. Detailed emissions prediction for a turbulent swirling nonpremixed flame / R. F. D. Monaghan, et al. // Energy Fuels. 2013. Vol. 28 (2). Pp. 1470-1488.
67. Egorov Y., Forkel H., Ferreira J. CFD Prediction of Partload CO Emissions using a Two-Timescale Combustion Model // Proceedings of ASME Turbo Expo 2010: Power for Land, Sea and Air.
68. Experimental and numerical studies of pressure effects on syngas combustor emissions / H. Wang, et al. // Applied Thermal Engineering. 2016. Vol. 102. pp. 318-328.
69. Felden A. CANTERA Tutorials. A series of tutorials to get started with the python interface of Cantera version 2.1.1, CERFACS, 2015

70. Fichet V., Kanniche M., Plion P., Gicquel O. A reactor network model for predicting NO_x emissions in gas turbines. *Fuel*, v. 89. iss. 9, p. 2202-2210, 2010.
71. Gas Research Institute. GRI-Mech 3.0, URL <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/>.
72. Greenwood S.A. Low Emission Combustion Technology for Stationary Gas Turbine Engines / S.A. Greenwood // *Proceedings of the 29th Turbomachinery Symposium*, Texas A&M, Houston, TX, 2000.
73. Grimm F. Low Order Reactor Network Based Prediction of Pollutant Emissions Applied to FLOX Combustion / F. Grimm // *Energies*, 2022.
74. Khodayari H., Ommi F., Saboohi Z. A review on the applications of the chemical reactor network approach on the prediction of pollutant emissions // *Aircraft Engineering and Aerospace Technology*. 2020. Vol. 94, no. 4. Pp. 551-570.
75. Kutlumukhamedov A. R., Skiba D. V., Bakirov F. G. Combined Method for Prediction of Carbon Monoxide Emission from Gas Turbine Combustion Chambers. 2021 International Scientific and Technical Engine Conference (EC), Samara, Russian Federation, 2021, pp. 1-4, doi: 10.1109/EC52789.2021.10016861.
76. Lefebvre A. H. Gas Turbine Combustion: Alternative Fuels and Emissions, third ed. / A. H. Lefebvre, D.R. Ballal. – CRC Press, 2010.
77. Lee M. C. Gas turbine combustion performance test of hydrogen and carbon monoxide synthetic gas / M. C. Lee, S. B. Seo, J. H. Chung, S. M. Kim, Y. J. Joo, D. H. Ahn // *Fuel*: Volume 89, Issue 7. - 2010.- P.1485-1491.
78. Lieuwen T.C. Gas Turbine Emissions / T.C. Lieuwen, V. Yang. - Cambridge University Press, 2013
79. Marchand M.D. Multi-Dimensional Carbon Monoxide Emissions Predictor for Preliminary Gas Turbine Combustor Design Optimization. Master Thesis, Aerospace Studies University of Toronto, 2013, p. 121.
80. Matveev S.S., Idrisov D.V., Gurakov N.I., Gopalakrishna Gangisetty, Zubrilin I.A., Matveev S.G., Shchepakina E.A. Simulation of CO and CO₂ emissions in model combustion chamber based on the combination LES and Reactor Network model // *E3S Web of Conferences* 80(6-4):03008. doi:10.1051/e3sconf/20198003008.

81. Matveev S.S., Semenikhin A.S., Litvinenko Z.S., Gurakov N.I., Idrisov D.V., Chechet I.V., Savchenkova A.S., S.G. Matveev Study of the formation of polycyclic aromatic hydrocarbons in the combustion chambers of aircraft engines // AIP Conference Proceedings 2304, 020015 (2020). doi:10.1063/5.0033856.
82. Mori G. Micro Gas Turbine Combustor Emissions Evaluation Using the Chemical Reactor Modelling Approach / G. Mori, V. V. Anisimov // ASME Turbo Expo 2007. – 2007
83. Nanduri J.R., Parsons D. R., Yilmaz S.L., Celik I.B., Strakey P.A. Assessment of RANS-based turbulent combustion models for prediction of emissions from lean premixed combustion of methane // Combust. Sci. and Tech., 182: 794-821, 2010.
84. Nicol D.G. Chemical Reactor Modeling Applied to the Production of Pollutant Emission in LP Combustors / D.G. Nicol, T. Rutar, S.M. Martin, P.C. Malte, D.T. Pratt // AIAA.-1997.
85. Novosselov, I.V. Chemical Reactor Network Application to Emissions Prediction for Industrial DLE Turbine / I.V. Novosselov, P.C. Malte, S. Yuan, R. Srinivasan, J.C.Y. Lee // ASME Turbo Expo 2006. - 2006.
86. Park J. Prediction of NO_x and CO emissions from an industrial lean-premixed gas turbine combustor using a chemical reactor network model / J. Park, et al. // Energy Fuels. 2013. Vol. 27 (3). Pp. 1643-1651.
87. Peters N. Combustion Theory: CEFRC Summer School / N. Peters – Princeton: RWTH Aachen University, 2010. – 284 p.
88. Pitsch H. Combustion Theory and Applications in CFD. Day 2 Part 3. 2018 Princeton–CEFRC Combustion Summer School : video.
89. Poinso T. Theoretical and Numerical Combustion / T. Poinso, D. Veynante. – 2nd ed. – Edwards, 2005. – 522 p.
90. Rosati B. Prediction of emissions from combustion systems using 0D and 1D reacting flow models, Thesis, Delft University of Technology, 2015, p. 138.

91. Rezvani R. A conceptual methodology for the prediction of engine emissions, Dissertation, College of Engineering Georgia Institute of Technology, 2010, p. 285
92. Rutar T., Malte P. C. NO_x formation in high-pressure jet-stirred reactors with significance to lean-premixed combustion turbines // J. Eng. Gas Turbines Power. 2002. Vol. 124 (4). Pp. 776-783.
93. Rutar, T. NO_x and CO Formation for Lean-Premixed Methane-Air Combustion in a Jet-Stirred Reactor Operated at Elevated Pressure, Ph.D. Thesis, University of Washington, Seattle, WA. 2000.
94. Shah G. The computation of radiation heat transfer, Thesis, Imperial College of Science and Technology, London, 1979, p. 192
95. Sam Ghasi-Hesami Cost Effective Emissions and Species Predictions via Coupling of Computational Fluid Dynamics and Chemical Reactor Network Analysis, Thesis, Concordia University, 2009, p.101
96. Turns, Stephen R. An Introduction to Combustion: concepts and applications/Stephen R. Turns. – 2nd ed. 676 p. – McGraw-Hill series in mechanical engineering, 2000.
97. Westbrook, C.K. Simplified Reaction Mechanism for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames / C.K. Westbrook, F.L. Dryer // Combustion Science and Technology.-1981
98. Yuasa S. Effects of Secondary Premixture-Injection on Combustion Characteristics of a Lean Premixed Propane Combustor for 200 W-Class Gas Turbines / S. Yuasa, R. Awano, T. Sakurai // GTSJ. – 2007.
99. Zubrilin I.A., Gurakov N.I., Semenikhin A.S., Kolomzarov O.V., Matveev S.G., Anisimov V.M. Simulation of CO emission in primary and secondary zone of a small gas turbine combustion chamber using CFD and reactors network // ASME 2019 Gas Turbine India Conference. doi:10.1115/GTINDIA2019-2594.
100. Zubrilin I.A., Matveev S.G., Marrone A., Pastrone D.G. Simulation of Pollutant Emissions in a Small-Size GTE Based on the Reactor Network Model // Bulletin

of the Lebedev Physics Institute Vol. 45 № 10 pp.308-310. 2018.
doi:10.3103/S1068335618100056.