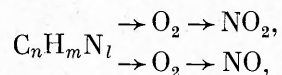


увеличивается и, по-видимому, не зависит от изменения  $\text{NO}_2$ , а  $\text{NO}_2$  претерпевает сильные изменения, вначале увеличиваясь, а затем резко уменьшаясь. При этом, если ввести в рассмотрение величину выхода оксидов азота ( $a_N$ ), представляющую собой процентное отношение оксидов азота к теоретически возможному их количеству при 100 %-ном переходе топливного азота в оксиды, то выход  $\text{NO}$  сохраняется неизменным с увеличением  $N$ , а выход  $\text{NO}_2$  резко падает (см. рис. 5). Анализ экспериментальных данных дает основания полагать, что топливные  $\text{NO}$  и  $\text{NO}_2$  образуются двумя схематичными путями:



причем нижняя ветвь работает самостоятельно и не зависит от выхода  $\text{NO}_2$ , а в верхней ветви происходят сложные кинетические превращения, не объяснимые реакциями (5) — (7), и в условиях стехиометрической смеси явно ощущается дефицит кислорода для образования  $\text{NO}_2$ .

На основании результатов экспериментальных исследований можно предположить, что соотношение  $\text{NO}$  и  $\text{NO}_2$  на выходе из ГТД есть результат нескольких относительно независимых процессов, происходящих в камере сгорания. Реакции (5) — (7), объясняя влияние топлив, охватывают далеко не все количество  $\text{NO}$ , образующееся в пламени, и свойственны относительно низкотемпературным пламенам, характерным для режимов работы двигателей, близких к малому газу. Основная доля топливных  $\text{NO}$  и термических  $\text{NO}$ , образующихся по механизму Зельдовича, минует стадию быстрого превращения в  $\text{NO}_2$  и последующее преобразование в  $\text{NO}$ . Последним, по-видимому, объясняется очень высокое значение  $\text{NO}/\text{NO}_x$  на высоконагруженных режимах работы авиационных ГТД (см. рис. 4). Окончательная величина концентраций  $\text{NO}$  и  $\text{NO}_2$  будет зависеть прежде всего от того, какая часть  $\text{NO}$  будет захвачена реакциями превращения (5) — (7), а какая пройдет, минуя их. Дальнейшее изучение процессов образования  $\text{NO}$  и  $\text{NO}_2$  должно быть связано с постановкой корректных модельных экспериментов с как можно более независимым управлением каждым из предполагаемых механизмов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Лефевр А. А. Процессы в камерах сгорания ГТД. — М.: Мир, 1986.
2. Теория воздушно-реактивных двигателей/Под ред. С. М. Шляхтенко. — М.: Машиностроение, 1975.
3. Горбатко А. А., Щербаков В. И., Худяков Е. И. и др. Тр. ЦИАМ, № 983.
4. Образование и разложение загрязняющих веществ в пламени. — М.: Машиностроение, 1981.
5. Sano T. Comb. Sci. and Technol., 1982, 29, 3—6, 261.
6. Jaasma D., Borman G. Ibid., 1980, 23, 1—2, 83.

Поступила в редакцию 16/III 1987,  
после доработки — 22/IX 1987

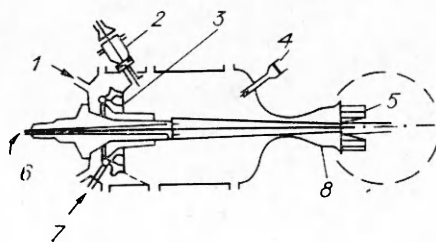
### ПРОСТАЯ ОДНОМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ВЛИЯНИЯ ЗАГРЯЗНЕННОСТИ ВОЗДУХА НА СВЕРХЗВУКОВОЕ ГОРЕНИЕ

С. И. Барановский, А. С. Надворский, Д. Д. Ромашкова  
(Москва)

Сверхзвуковое горение в каналах экспериментально исследуется, как правило, в условиях присоединенного воздухопровода на модельных установках, имитирующих требуемые режимные параметры нагревом поступающего воздуха [1]. Наиболее часто используются кауперные, электро-

Рис. 1. Принципиальная схема огневого подогревателя.

1 — подача воздуха и кислорода; 2 — форкамера; 3 — шатровые головки; 4 — термопара и датчик давления; 5 — профиль скорости на выходе из подогревателя; 6 — подача топлива через центральное тело; 7 — подача бензина, водорода; 8 — сверхзвуковое сопло.



дуговые и огневые типы подогревателей. Влияние способа подогрева на адекватность моделирования горения отмечалось во многих работах (например, [1, 2]), однако строгие количественные оценки этих эффектов проводились только в [3, 4].

По кинетическим и термодинамическим свойствам холодный и подогретый воздух неадекватны из-за появления активных радикалов и за счет дополнительных молекулярных соединений, отсутствующих в чистом воздухе атмосферы. Разница кинетических свойств реагирующих смесей особенно существенна при сверхзвуковых скоростях течения, так как в этом случае элементарные оценки указывают на сравнимость времени пребывания смеси в канале и общего времени реакции.

В данной работе на основе [4] предпринята попытка численного моделирования влияния типа подогрева на горение водородно-воздушной смеси в сверхзвуковом потоке для выяснения особенностей этих эффектов с целью количественной их оценки и выявления возможностей управления ими.

Самый «чистый», практически не изменяющий состав воздуха — каптерный подогреватель (КП) [5], но в силу конструктивной сложности и значительных габаритов он применяется ограниченно. Более широко используется электродуговой подогреватель (ЭДП), в котором осуществляется нагрев до высоких, порядка нескольких тысяч градусов, температур. В воздухе, выходящем из такого подогревателя, обнаружено до 4 %  $\text{NO}_x$  [6].

В наиболее простых и распространенных огневых подогревателях (ОП) организуется интенсивное смешение топлива (керосин, бензин или водород) с воздухом и воспламенение смеси дежурным факелом. Схема типичного огневого подогревателя [7] представлена на рис. 1. Небольшие скорости течения, наличие шатровых головок, стабилизаторов для образования множества рециркуляционных зон позволяют считать реакцию топлива с окислителем завершённой. Смесь продуктов сгорания обогащается кислородом, чтобы доля  $\text{O}_2$  в ней соответствовала воздуху.

Учитывая равномерность поля скорости воздушного потока после разгона в сверхзвуковом сопле (см. рис. 1), а также данные хроматографического анализа проб из различных точек в выходном сечении сопла, свидетельствующие об однородности химического состава [7], можно по равновесной модели рассчитать содержание основных компонентов при следующих допущениях:

- 1) все реагенты находятся в газовой фазе;
- 2) полное выгорание топлива, полнота сгорания  $\eta = 1$  (либо  $\eta$  неизвестна);
- 3) коэффициент избытка окислителя  $\alpha \geq 0,8$  (при меньших  $\alpha$  возможно выпадение конденсата [3]);
- 4) температура смеси на выходе  $T_{\text{вых}} \geq 900$  К, скорости течения малы, число Маха  $M \ll 1$ .

Была разработана программа SHON на подмножестве языка ФОРТРАН-4, пригодном для ЭВМ ЕС и СМ, использующая лишь основные четырнадцать компонентов смеси  $\text{C} + \text{H} + \text{O} + \text{N}$ , участвующих в 10 реакциях. Система равновесных уравнений решается методом квазилинеализации типа Ньютона — Рафсона с выбором начального при-

Таблица 1

Состав смеси на выходе огневого подогревателя

Компоненты	Водородный подогреватель [9]			Бензиновый подогреватель [7]		
	Опыт ( $T = 1760$ К)	Расчет при		Опыт в сухой пробе ( $T = 1750$ К)	Расчет при	
		$T = 1760$ К	$T = 950$ К		$T = 1750$ К	$T = 950$ К
O <sub>2</sub>	0,26	0,248	0,250	0,19±0,01	0,186	0,187
H <sub>2</sub> O	0,15	0,158	0,152	—	0,096	0,096
N <sub>2</sub>	0,59	0,590	0,598	0,63±0,01	0,621	0,622
CO <sub>2</sub>	—	—	—	0,089±0,01	0,094	0,094
H <sub>2</sub>	—	2,145·10 <sup>-5</sup>	1,669·10 <sup>-12</sup>	—	2,092·10 <sup>-6</sup>	2,561·10 <sup>-12</sup>
OH	—	5,907·10 <sup>-4</sup>	8,107·10 <sup>-8</sup>	—	2,704·10 <sup>-4</sup>	4,107·10 <sup>-8</sup>
H	—	5,059·10 <sup>-8</sup>	2,112·10 <sup>-16</sup>	—	9,393·10 <sup>-8</sup>	4,907·10 <sup>-16</sup>
O	—	2,603·10 <sup>-5</sup>	2,212·10 <sup>-11</sup>	—	9,188·10 <sup>-6</sup>	9,019·10 <sup>-12</sup>
NO	—	3,633·10 <sup>-3</sup>	2,1422·10 <sup>-5</sup>	—	3,107·10 <sup>-3</sup>	1,888·10 <sup>-5</sup>
CO	—	—	—	—	7,71·10 <sup>-6</sup>	1,665·10 <sup>-12</sup>

Примечание. Водородный подогреватель:  $G_T = 0,045$  кг/с,  $G_B = 2,059$  кг/с,  $G_{O_2} = 0,540$  кг/с,  $p = 0,9$  атм. Бензиновый подогреватель:  $G_T = 0,123 \pm 0,003$  кг/с,  $G_B = 2,10 \pm 0,02$  кг/с,  $G_{O_2} = 0,49 \pm 0,01$  кг/с,  $p = 15,5$  атм ( $G_T$ ,  $G_B$ ,  $G_{O_2}$  — расходы топлива, воздуха и кислорода;  $p$  — статическое давление). Для водородного подогревателя приведена массовая концентрация, для бензинового — объемная. Бензин Б-70 — С<sub>7.267</sub>H<sub>14.796</sub>.

ближения аналогично [8]. Основное достоинство программы состоит в малом времени счета и простоте реализации.

Расчет химического состава на выходе огневого подогревателя (табл. 1) при использовании в качестве топлива водорода [9] и бензина Б-70 показывает, что погрешность вычислений не больше ошибки измерения в этих опытах. В зависимости от типа подогрева в воздухе присутствуют примеси: 1) Н, О, НО<sub>2</sub>, 2) NO, NO<sub>2</sub> (ЭДП), 3) СО, СО<sub>2</sub> (бензиновый ОП), 4) Н<sub>2</sub>O (водородный и бензиновый) ОП. Рассмотрим их влияние на горение системы Н<sub>2</sub> + воздух в диапазоне  $p = 0,1 \div 30$  атм,  $T = 300 \div 3000$  К в рамках прямой кинетической задачи.

Выбор определяющих, самых важных стадий химического механизма представляет собой сложнейшую задачу. Простым перебором стадий ее не решить. Нужны критерии выбора, одним из которых является кинетическая доля

$$\gamma_{ij} = \omega_{ij} / \sum_{j=1}^N \omega_{ij}, \quad (1)$$

где  $\omega_{ij}$  — скорость образования  $j$ -го компонента в реакции. Но можно показать [2], что существуют ситуации, когда он не годится, ибо та или иная реакция может оказаться медленной по одному компоненту и быстрой по другому. Кроме того, кинетическая доля не нормирована. Более общий критерий — термодинамическая доля [2], учитывающая не только отклонение реагирующей системы от равновесия, но и чисто кинетические особенности:

$$q_j = \dot{G}_j / \sum_{j=1}^N \dot{G}_j, \quad (2)$$

$$\dot{G}_j = -RT \sum_{j=1}^N (\omega_j^+ - \omega_j^-) \ln (\omega_j^+ / \omega_j^-),$$

где  $\dot{G}_j$  — скорость изменения неравновесной свободной энергии Гиббса по времени. Доля стадии  $q_j$  обобщается на весь детальный кинетический механизм введением (в терминах [2])  $\delta$ -представительности. Критерий (1) также не дает достаточных условий для построения оптимального механизма, так как имеется произвол в выборе минимального значения

Таблица 2

Реакция	$K_j$				$K_{-j}$				$\Delta, \%$
	A	$\alpha$	n	$\beta$	A	$\alpha$	n	$\beta$	
1. $H_2 + O_2 = 2OH$	1,475	13	—	19 250	4,6	11	—	10 230	200
2. $OH + H_2 = H_2O + H$	1,144	9	1,3	1 825	4,975	9	1,3	9 355	50
3. $H + O_2 = OH + O$	1,445	14	—	8 250	1,165	13	—	280	30
4. $O + H_2 = OH + H$	1,807	10	1	4 480	7,994	9	1	3 440	30
5. $H_2 + M = 2H + M$	4,754	18	-1	52 650	1,088	18	-1	—	50
6. $H_2O + M = H + OH + M$	6,766	23	-2	60 180	3,626	22	-2	—	100
7. $H_2O_2 + M = 2OH + M$	1,2	17	—	22 850	8,75	14	—	28 325	200
8. $HO_2 + M = H + O_2 + M$	1,021	16	—	22 960	7,253	15	—	-500	30
9. $HO_2 + H_2 = H_2O_2 + H$	7,25	11	—	9 900	1,55	13	—	2 000	300
10. $HO_2 + H_2 = H_2O + OH$	6,022	11	—	9 400	2,737	11	—	37 110	500
11. $HO_2 + H_2O = H_2O_2 + OH$	2,5	13	—	16 250	1,15	13	—	885	50
12. $2HO_2 = H_2O_2 + O_2$	3,0	12	—	—	1,25	11	0,5	20 600	300
13. $H + HO_2 = 2OH$	2,409	14	—	950	2,59	13	—	21 130	200
14. $H + HO_2 = H_2O + O$	1,4	13	—	1 045	0,55	13	—	29 000	300
15. $H + HO_2 = H_2 + O_2$	2,409	13	—	350	7,299	13	—	29 550	250
16. $O + HO_2 = OH + O_2$	4,818	13	—	500	6,423	13	—	28 660	500
17. $H + H_2O_2 = H_2O + OH$	1,0	15	—	5 350	1,15	14	—	39 850	500
18. $OH + M = O + H + M$	6,843	18	-1	51 610	3,626	18	-1	—	100
19. $HO_2 + OH = H_2O + O_2$	3,011	13	—	—	3,962	14	—	36 730	1500
20. $O + N_2 = N + NO$	7,6	13	—	38 000	1,6	13	—	—	20
21. $H + NO = N + OH$	2,0	14	—	23 650	1,0	14	—	—	50
22. $O + NO = N + O_2$	1,5	9	1	19 500	6,4	9	1	3 150	30
23. $NO + OH = H + NO_2$	2,0	11	0,5	15 500	3,5	14	—	740	20
24. $NO + O_2 = NO_2 + O$	1,0	12	—	22 800	1,0	13	—	302	30
25. $NO_2 + H_2 = H + HNO_2$	2,4	13	—	14 500	5,0	11	0,5	1 500	80
26. $NO_2 + OH = NO + HO_2$	1,0	11	0,5	6 000	3,0	12	0,5	1 200	100
27. $HNO_2 + M = NO + OH + M$	5,0	17	-1	25 000	8,0	15	—	-1000	150
28. $NO_2 + M = NO + O + M$	1,1	16	—	32 712	1,1	15	—	-941	50
29. $CO + OH = CO_2 + H$	1,686	7	1,3	-330	1,756	9	1,3	51 610	30
30. $CO + HO_2 = CO_2 + OH$	1,506	14	—	2 200	1,673	15	—	42 950	100
31. $O + CO + M = CO_2 + M$	2,539	15	—	11 900	4,959	17	—	64 670	300
32. $O + CO_2 = CO + O_2$	2,107	13	—	26 890	2,529	12	—	24 000	30

Примечание.  $K_j = A \times 10^\alpha \times T^n \times e^{-E_j/T}$ ; размерности  $K_j, K_{-j}$  для бимолекулярных реакций  $\text{см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$ , для тримолекулярных —  $\text{см}^6/(\text{моль}^2 \cdot \text{с})$ .  $\Delta$  — ошибка определения  $K_j, K_{-j}$ .

$\delta_{\text{min}}$ , ниже которого можно считать стадию непредставительной. Отсутствует также уверенность в неизменности свойств построения механизма при вариации констант скоростей реакций, а погрешность измерения некоторых констант доходит до 800% [2, 10]. Поэтому обязательно тщательное тестирование механизма на экспериментальных данных.

При построении детального кинетического механизма в данной работе ставились условия: описание II—IV пределов воспламенения, адекватный учет влияния добавок, определение времен задержки воспламенения  $\tau_3$ , длительности реакции  $\tau_p$ , причем погрешность расчетов не должна быть больше 10%. Полученный детальный кинетический механизм  $\Gamma^{\text{опт}}$  с  $\delta \geq 0,9$  отличается от использовавшихся ранее. Для системы  $H_2 + O_2$  он включает 19 обратимых стадий, выбранных на основе рекомендаций [2], но значения большинства констант скоростей выбирались из [10], что, впрочем, не противоречит [2], так как в [2] приведены доверительные интервалы изменения констант (табл. 2).

Влияние NO и  $NO_2$  на  $\tau_3$  в системе  $H_2 + O_2 + NO_x$  исследовано экспериментально и теоретически в [11], где предложена и приведена система реакций, включенная в  $\Gamma^{\text{опт}}$  с теми же константами скоростей

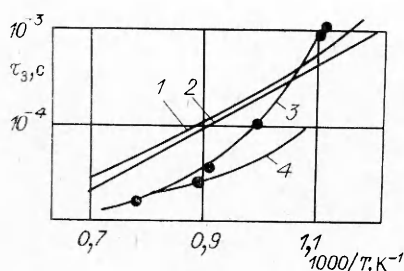


Рис. 2. Расчет времени задержки воспламенения стехиометрической смеси  $H_2 + O_2$  по различным кинетическим механизмам ( $p = 1$  атм).

1, 2 — 8-стадийный механизм с константами скоростей из [1, 12]; 3 — расчет авторов по  $\Gamma^{opt}$ ; 4 — 20-стадийный механизм (заимствовано из [1]); точки — эксперимент [11].

и дополненная расширенным механизмом Я. Б. Зельдовича образования  $NO_x$ . Стадии 29—32 описывают взаимодействие  $CO_x$ , содержащегося в загрязненном воздухе, со смесью  $H_2 + O_2$ . Из 16 возможных реакций по критерию (2) выбрано лишь 4, так как доля  $q_i$  остальных стадий была во всем диапазоне  $p, T$  значительно меньше. Константы скоростей взяты из [10].  $\Gamma^{opt}$  проверялась на многочисленных опытных данных поэтапно, сначала для чистой смеси  $H_2 + O_2$ , затем с добавками  $H_2O$  [1],  $NO_x$  [11]. Для  $H_2 + O_2 + NO_x + H_2O$   $\Gamma^{opt}$  удовлетворяет указанным требованиям, эксперименты же со смесями  $H_2 + O_2 + CO_x$  в нужном диапазоне  $p$  и  $T$  авторам не известны.

Размерность  $\Gamma^{opt}$  достаточно велика. Возможно ли ее уменьшение? В этой связи можно констатировать, что при горении смеси  $H_2 + \text{воздух} + H_2O$   $NO_x$  выделяется незначительно, причем основная часть после завершения горения. Следовательно, лишь при наличии априори  $NO_x$  в воздухе (обычно после подогрева в ЭДП) есть смысл учета стадий 19—29. Аналогично учет  $CO_x$  нужен лишь после огневого подогрева с помощью углеводородного топлива. Иногда из всех кинетических характеристик необходимо знать только  $\tau_3$ . В этом случае используют брутто-механизмы из 8—9 стадий типа, предложенного Даффом [3], т. е.  $HO_2$  и  $H_2O_2$ , имеющие значение при низких либо при очень высоких температурах [1], отбрасываются, как несущественные.

Такой подход представляется малообоснованным, так как:

а) погрешность расчета  $\tau_3$  у брутто-механизма удовлетворительна в узком диапазоне. На рис. 2 показан расчет  $\tau_3$  по механизму Даффа с различными константами скоростей из [1, 12]. Здесь и далее  $\tau_3$  определяется по пятипроцентному повышению температуры;

б) уменьшение времени счета из-за сокращения стадий с 19 до 8—9 несущественно, поскольку время счета определяется в основном количеством дифференциальных уравнений для химических компонентов, а не количеством реакций. При использовании численных методов типа рассматриваемых ниже нет большой разницы между решением шести либо восьми уравнений;

в) брутто-механизм включает реакции  $O_2 + M = O + O + M$  и  $H_2O + O = 2 OH$ , кинетические и термодинамические доли которых незначительны в выделенном диапазоне  $p, T$  (они не входят в  $\Gamma^{opt}$ ), и вместе с тем не учитывает ряд очень важных стадий, например  $H + O_2 + M = HO_2 + M$ , что влияет на точность расчетов. Даже полный 20-стадийный механизм [1], видимо, из-за неучета некоторых реакций приводит к немалым погрешностям (см. рис. 2).

Для решения прямой кинетической задачи наиболее часто применяют численные методы, не ориентированные на конкретные химические механизмы и не использующие линеаризацию исходной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), либо линейное преобразование переменных с целью снижения жесткости кинетических уравнений [13]. На основании накопленного опыта решения жестких ОДУ в [14] сформулированы условия, которым должен удовлетворять численный метод решения ПКЗ для детального кинетического механизма: устойчивость  $A(L)$ , относительная точность решения  $\epsilon \leq 10^{-3}$ , степень метода не менее второй, равномерное приближение экспоненциальной

составляющей решения, минимальное время решения на ЭВМ, простота программной реализации и разумный объем необходимой оперативной памяти.

С учетом этих условий выбор алгоритма сводится к методам Гира и Розенброка. Метод Гира — линейный, многошаговый,  $A$ -устойчивый, переменной степени с изменяющимся шагом. Несмотря на большую его популярность, появление все новых модификаций, следует отметить его неэффективность для ряда задач с большой жесткостью [15]. В некоторых реализациях степень метода понижается до первой на жестких участках. Все известные программы весьма объемны.

В данной работе используется метод Розенброка в модификации Ваннера (ROW) [16], удовлетворяющий сформулированным выше условиям. Он обобщает метод Рунге — Кутта, для автономного ОДУ имеет вид

$$Z_{n+1} = Z_n + \sum_{i=1}^R p_i K_i,$$

$$K_i = hf \left( Z_n + \sum_{s=1}^{i-1} \beta_{is} K_s \right) + \gamma h \frac{df \left( Z_n + \sum_{s=1}^{i-1} \gamma_{is} K_s \right)}{dz}, \quad (3)$$

где  $\gamma_{is}$ ,  $\gamma$ ,  $\beta_{is}$ ,  $p_i$  — параметры;  $R$  — степень метода. Правая часть (3) содержит якобиан функции  $f$ , зависящий от шага интегрирования  $h$  и всех предыдущих векторов  $K_s$ . Следовательно, основной объем вычислений на ЭВМ приходится на якобиан. Попытка уменьшить время счета приравнением к нулю  $\gamma_{is}$  либо использованием одного значения якобиана на протяжении нескольких шагов интегрирования оказалась неконструктивной. Логично решение Ваннера, представившего якобиан как сумму двух членов. В матричном виде уравнения для  $K_i$  в ROW записываются следующим образом:

$$(I - \gamma h \Phi') K_i = hf \left( Z_n + \sum_{s=1}^{i-1} \beta_{is} K_s \right) + h \Phi' \sum_{s=1}^{i-1} \gamma_{is} K_s, \quad i = 1 \div R. \quad (4)$$

Здесь  $I$  — квадратная единичная матрица;  $\Phi' = \left\| \frac{\partial f}{\partial z} \right\|$ . Схема (4) в отличие от (3) балансна, не продуцирует отрицательных решений.

Для определения  $K_i$  решается система (4), обладающая рядом особенностей, делающих неэффективным [17] либо невозможным обращение матрицы  $(I - \gamma h \Phi')$  обычными методами, поэтому используется ее  $LU$ -разложение с помощью подпрограммы из [18]. Элементы матрицы при решении прямой кинетической задачи записываются аналитически, что позволяет считать их точно с минимальными затратами по времени.

В [16] предложены методы ROW 3- и 4-й степеней, причем их параметры выбираются так, что  $\gamma$ ,  $\gamma_{is}$ ,  $\beta_{is}$  для 3-й степени (ROW3) входят в параметры ROW4. Это опять же сокращает время счета и используется для выбора оптимальной величины шага по соотношению между необходимой  $\varepsilon$  и действительной локальной погрешностью  $\hat{\varepsilon}$ :  $h_{n+1} = h_n \times 0,9 (\varepsilon/\hat{\varepsilon})^{1/4}$  при ограничениях на вариацию шага  $h_{n+1} = \max \{1,5h_n, h_{n+1}\}$ ,  $h_{n+1} = \min \{0,5h_n, h_{n+1}\}$ . Локальная ошибка определяется из выражения

$$\hat{\varepsilon} = \max |Z_{n+1} - \tilde{Z}_{n+1}| / S_j,$$

где  $Z_{n+1}$ ,  $\tilde{Z}_{n+1}$  получены из ROW3 и ROW4, а  $S_j = \max \{1, |Z_{n+1}|\}$ . Отметим, что новый шаг  $h_{n+1}$  принимается лишь в том случае, если  $\hat{\varepsilon} \leq \varepsilon$ , в противном случае производится «холостой» шаг. Обычно подобное явление имеет место в начале отрезка интегрирования при завышенных начальных значениях шага.

Для нежестких ОДУ разница между ROW3 и ROW4 незначительна, точность метода становится избыточной. В этом случае нужны ог-

раничения:

$$\hat{\varepsilon} = \max \{\hat{\varepsilon}, 10^{-8}\}; h_{n+1} = \min \{0,01, h_{n+1}\}.$$

Программа, реализующая ROW, написана на языке ФОРТРАН-4 для ЕС ЭВМ и невелика по объему. Все вычисления выполняются без двойной точности. Тестирование алгоритма ROW проводилось в [16] и авторами данной работы на 25 модельных жестких ОДУ с различными особенностями. Проверка подтвердила надежность метода и его эффективность, а также малое время счета. Оказалось, что ROW в среднем в 2 раза быстрее по времени счета, чем версия GEAR — DRIVE [16], в 3—4 раза быстрее метода [19]. На нежестких задачах она проигрывает в 1,5 раза лучшим алгоритмам типа Кутта — Мерсона [18] и другим, ориентированным исключительно на нежесткие уравнения, и в то же время не менее чем в 2 раза быстрее стандартных алгоритмов из пакета прикладных программ ЕС ЭВМ.

Рассмотрим решение прямой кинетической задачи в нуль-мерном приближении. Запишем кинетические уравнения для реактора идеального смешения

$$d\gamma_i/dt = \omega_i, \quad h^0 = \sum_i \gamma_i \dot{I}_i'(T) = \text{const}, \quad p = \rho RT/\mu = \text{const}, \quad (5)$$

где  $t$  — время, а  $\omega_i$  находятся по  $\Gamma^{\text{опт}}$ .

Рассмотрим влияние примесей на  $\tau_3$  для смеси  $\text{H}_2 + \text{воздух}$ . Радикалы  $\text{H}$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{HO}_2$  способны резко сдвинуть влево начало реакций [2, 3]. Незначительная ( $<10^{-5}$  моль/л) концентрация их в несколько раз снижает  $\tau_3$ , не исключая, естественно, вообще задержку воспламенения. В [2] отмечается, что искусственное задание концентраций указанных радикалов больше максимальных, достижимых при горении, не приводит к изменению  $\tau_3$ . Но расчет по (5) показывает невозможность такого подогрева воздуха, чтобы это условие выполнялось для всех радикалов одновременно. Поэтому бороться с их влиянием можно уменьшением содержания радикалов на выходе подогревателя путем увеличения его длины (см. рис. 1), с тем чтобы успевали завершаться реакции рекомбинации, либо точного выдерживания необходимого температурного режима — снижения температуры смеси до минимально допустимой, поскольку тогда (см. табл. 1) концентрация радикалов уменьшается на несколько порядков. В реальном подогревателе падение статической температуры зависит от числа Маха и интенсивности охлаждения стенок.

Влияние  $\text{NO}_x$  на  $\tau_3$  стехиометрической смеси  $\text{H}_2 + \text{O}_2$  резко возрастает с повышением давления. На рис. 3 приведены данные при  $p = 2$  атм. Видна также роль начальной температуры: при  $T_0 = 800$  К эффект максимален (сокращение задержки на порядок). Экспериментальные точки заимствованы из [11], расчет по  $\Gamma^{\text{опт}}$ . Приведенная в [11] теоретическая кривая по 60-стадийному кинетическому механизму дает незначительно отличающийся результат.

Итак, небольшая примесь  $\text{NO}_x$  ( $<1,5\%$  по объему) существенно изменяет кинетические свойства смеси. Одним из методов борьбы с образованием  $\text{NO}_x$ , по-видимому, может быть подогрев воздуха в ЭДП до значительно большей температуры, чем нужная, и далее перемешивание его с холодным, но чистым воздухом для снижения концентрации  $\text{NO}_x$  в получающейся смеси.

Наличие  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{CO}_2$  в воздухе характерно при огневом подогреве (водородном и бензиновом). Зависимость воздействия этих примесей на  $\tau_3$  от  $T_0$  показана на рис. 4. При  $T_0 = 1000$  К добавка лишь значительного их количества (больше 15% по массе) изменяет  $\tau_3$ , причем эффекты от  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{CO}_2$  противоположны. С увеличением  $T_0$  вода выступает в роли промотора и ингибитора, суть этого эффекта объяснена в [2]. При  $T_0 = 1000$  К добавка воды приводит к более чем 3-кратному изменению  $\tau_3$ . Понятно, что в реальном случае подогретый воздух включает всегда несколько примесей, поэтому анализ по зависимостям, пред-

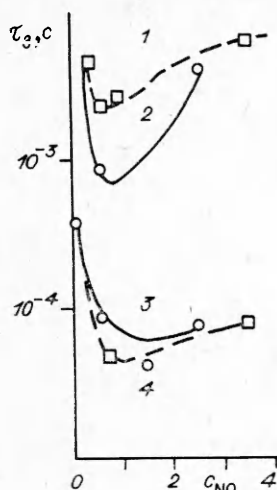


Рис. 3. Влияние  $\text{NO}_{2x}$  на  $\tau_3$  для стехиометрической смеси  $\text{H}_2 + \text{O}_2$  при различных начальных температурах ( $p = 2$  атм).  $\circ, \square$  — опыты [11] с добавками  $\text{NO}, \text{NO}_2$  соответственно;  $T_0, \text{K}$ : 1, 2 — 800, 3, 4 — 1000. Добавки: 1, 4 —  $\text{NO}$ , 2, 3 —  $\text{NO}_2$ .

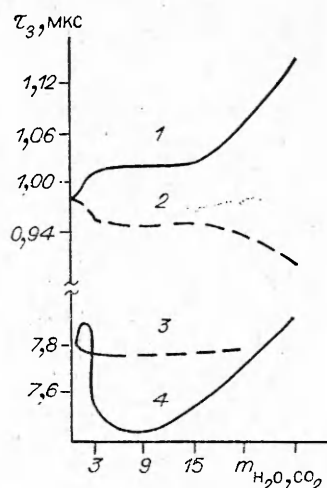


Рис. 4. Влияние  $\text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}$  на время задержки воспламенения в стехиометрической смеси  $\text{H}_2 + \text{O}_2$  ( $p = 1$  атм). Добавки  $\text{H}_2\text{O}, \text{CO}_2$  при  $T_0 = 1000 \text{ K}$  (1, 2) и  $1500 \text{ K}$  (3, 4).

ставленным на рис. 3, 4, полезен, но недостаточен; например, изменение  $\tau_3$  может быть и более значительным [4]. Из-за различия в удельной теплоемкости чистого и загрязненного воздуха меняется также величина максимально достижимой при горении температуры  $T_{\text{max}}$ , причем больше всего снижает  $T_{\text{max}}$  наличие  $\text{H}_2\text{O}$  (до 200 K), и в меньшей степени добавка  $\text{CO}_2$  [4].

При решении прямой кинетической задачи по (5) возможна оценка основных кинетических параметров, а также подбор и оптимизация состава подогретого воздуха с целью уменьшения влияния примесей. На практике следует еще учитывать возможные химические процессы при прохождении смеси через сверхзвуковое сопло (см. рис. 1). Кроме того, экспериментаторов интересуют не столько времена  $\tau_3$  и  $\tau_p$ , сколько расстояния, на которых реализуется задержка при конкретных условиях на входе в канал заданной геометрии.

Перейдем теперь к рассмотрению одномерной модели течения реагирующей смеси в канале. Исходная система газодинамических уравнений выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \rho v F &= \text{const}, \\ \rho v \frac{dv}{dx} + \frac{dp}{dx} &= 0, \\ h^0 + \frac{1}{2} v^2 &= \text{const}, \\ h^0 &= \sum_{i=1}^{15} \gamma_i \dot{I}_i^0(T), \quad \mu = 1 / \sum_{i=1}^N \gamma_i, \\ \rho v \frac{d\gamma_i}{dx} &= \tilde{\omega}_i, \quad i = 1 \div 15, \end{aligned} \quad (6)$$

где  $\tilde{\omega}_i = \rho \omega_i$ ;  $\omega_i$  — скорость образования  $i$ -го компонента по  $\Gamma_{\text{опт}}$ ;  $h^0$  — энтальпия;  $\rho$  — плотность;  $v$  — скорость;  $F$  — площадь канала.

В дифференциальной форме система (6) примет вид [4]



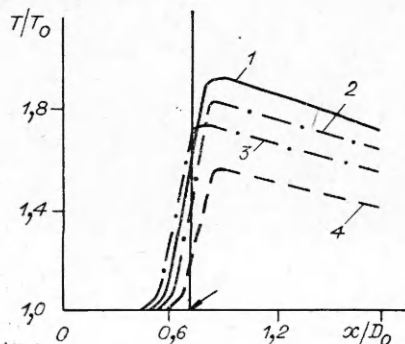
$$\begin{aligned}
\frac{dy_i}{dx} &= \frac{\omega_i}{v}, \quad i = 1 \div 15, \\
\frac{dv}{dx} &= \frac{v}{M^2 - 1} \left( \frac{1}{F} \frac{dF}{dx} - A \right), \\
\frac{d\rho}{dx} &= \rho \left[ \frac{M^2}{M^2 - 1} \left( \frac{1}{F} \frac{dF}{dx} - A \right) + A \right], \\
\frac{dT}{dx} &= -T \left[ \frac{(\kappa - 1) M^2}{M^2 - 1} \left( \frac{1}{F} \frac{dF}{dx} - A \right) + 13 \right], \\
A &= \frac{\mu}{v} \sum_{i=1}^{15} \omega_i - B, \quad B = \frac{1}{c_p T v} \sum_{i=1}^{15} \dot{i}_r^0(T) \omega_i, \\
M^2 &= \frac{v^2 \mu}{\kappa R T}, \quad c_p = \sum_{i=1}^{15} c_{p_i}^0(T) \gamma_i.
\end{aligned} \tag{7}$$

Отметим, что все уравнения системы жесткие.

По системе (7) возможен упрощенный анализ сверхзвукового течения перемешанной смеси  $H_2 + \text{воздух}$  в канале переменной площади, получение экстремальных оценок длины канала, расстояния задержки воспламенения и т. д. В реальном случае при раздельной подаче топлива и окислителя эти величины будут иными. Важно другое — если по модели (7) верно рассчитать режим подогрева, устраняющий либо уменьшающий кинетическое влияние примесей, то и при двумерном расчете диффузионного горения [7] выбранный режим будет подходить наилучшим образом, так как кинетические свойства определяются одним и тем же механизмом  $\Gamma^{\text{опт}}$ .

На рис. 5 приведены результаты одномерного расчета течения в комбинированном осесимметричном канале диаметром  $D_0 = 0,348$  м, состоящем из цилиндрического участка длиной 0,253 м и расширяющейся части с углом раскрытия  $1^\circ 21'$  [4]. На входе в канал  $M_{\text{вх}} = 3$ ,  $p_{\text{вх}} = 1$  атм, коэффициенты избытка воздуха в подогревателе и канале:  $\alpha_{\text{под}} = 1$ ,  $\alpha_{\text{кан}} = 4,2$ . Варьируется рабочее тело в ОП (водород, бензин Б-70) при  $T_0 = 1000$  К, смесь обогащается кислородом. Сравнение с кауперным подогревом по температурным кривым наглядно демонстрирует влияние способа подогрева и возможности модели. Кривая 2 соответствует бензиновому подогреву при  $\alpha_{\text{под}} = 3$ . На рис. 5 показана статическая температура, различие по температуре торможения еще больше.

Итак, предложенная простая модель течения с учетом детального кинетического механизма  $H_2 + \text{воздух} + NO_x + CO_x$  позволяет оценить



влияние типа подогрева на корректность экспериментального моделирования натуральных условий. Показано, что обогащение смеси кислородом является необходимым, но не достаточным условием корректного моделирования с помощью огневого подогрева. Огневой подогрев на углеводородном топливе предпочтительней водородного.

Рис. 5. Влияние рабочего тела огневого подогревателя на статическую температуру. Подогрев: 1 — кауперный; 2, 3 — бензиновый; 4 — водородный. Стрелкой обозначено место расширения канала.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Басв В. К., Головичев В. И., Третьяков П. К. и др. Горение в сверхзвуковом потоке. — Новосибирск: Наука, 1984.
2. Димитров В. И. Простая кинетика. — Новосибирск: Наука, 1982.

3. Edelman R. B., Spadaccini L. J. J. Spacecraft and Rockets, 1969, 6, 12, 1442.
4. Надворский А. С., Ромашкова Д. Д. Изв. АН БССР. Сер. физ.-энерг. наук, 1986, 3, 78.
5. Drewry J. E., Neer M. E., Scaggs M. A. AIAA Paper, 73—1320.
6. Orth R. C., Billig F. S., Grenlevsky P.— In: Progress in Aeron. and Astronautics. V. 34, 1972.
7. Барановский С. И., Левин В. М., Надворский А. С. и др.— В кн.: Процессы турбулентного переноса в реагирующих системах.— Минск, 1986.
8. Дайер, Мейплз. PTR, 1981, 5.
9. Cohen L. S., Guile R. N. NASA CR-1473, 1969.
10. Jensen D. E., Jones G. A. Comb. Flame, 1978, 32, 1.
11. Slack M., Grillo A. NASA CR-2198, 1977.
12. Sislian J. P., Evans J. S., Glass I. I. Canad. Aeron. Space J., 1979, 25, 1, 61.
13. Гольденберг М. Я., Полак Л. С., Левицкий А. А. Вычислительные методы в химической кинетике.— М.: Наука, 1984.
14. Луценко В. П., Надворский А. С., Ромашкова Д. Д.— В кн.: Научно-методические материалы по процессам авиадвигателей.— М.: Изд. ВВИА им. Жуковского, 1982.
15. Захаров А. Ю. Препринт ИПМ АН СССР, № 125, 1979.
16. Kaps P., Rentrop P. Numer. Math., 1979, 33, 55.
17. Ракитский Ю. В., Устинов С. М., Чернооруцкий И. Г. Численные методы решения жестких систем.— М.: Наука, 1979.
18. Форсайт, Малькольм, Моулер. Машинные методы математических вычислений.— М.: Мир, 1979.

*Поступила в редакцию 8/1 1987,  
после доработки — 26/V 1987*

## ВЛИЯНИЕ ТУРБУЛЕНТНОСТИ НА ГОРЕНИЕ РАСПЫЛЕННОГО ЖИДКОГО ТОПЛИВА

*В. Р. Кузнецов  
(Москва)*

Необходимость исследования горения распыленного жидкого топлива в турбулентном потоке обусловлена широким распространением этого способа в разнообразных технических устройствах и отсутствием единой точки зрения на механизм горения смеси капель и воздуха. Обычно рассматриваются две принципиально разные модели. В первой каждая капля окружена фронтом пламени, а расстояние от этого фронта до центра капли пропорционально ее диаметру [1, 2]. Во второй модели горение капель как индивидуальных образований невозможно, например, из-за большой кривизны пламени. Положение зоны реакций определяется смещением воздуха и топлива, испарившегося со всех капель, а расстояние от какой-нибудь капли до фронта пламени не связано с ее диаметром  $d$ .

Поскольку с уменьшением  $d$  растет поток топлива к фронту пламени, то возможно индивидуальное горение лишь достаточно крупных капель. С другой стороны, вследствие нестационарности турбулентных движений такие капли полностью никогда не увлекаются. Роль этого фактора ясна при сопоставлении скорости срыва пламени с капли  $w_m$  с пульсационной скоростью газа  $u$ . В нормальных условиях имеем  $w_m \approx 30$  см/с [3], в то время как в большинстве технических устройств  $u \approx 1 \div 10$  м/с, т. е. возможен срыв пламени даже с малоинерционных капель. Отсюда ясно, что роль турбулентности велика, а исследование ее влияния на горение распыленного жидкого топлива является важной задачей.

Для ее решения рассмотрим сначала горение капли, полностью увлеченной потоком. Оценим минимальный диаметр  $d_m$ , при котором возможно устойчивое горение. Из [4] следует, что удельный поток топлива к диффузионному пламени  $q$  не больше удельного потока топлива в нормальном пламени, распространяющемся по стехиометрической смеси, т. е.  $q < u_n \rho_0 z_s$  ( $u_n$ ,  $\rho_0$ ,  $z_s$  — скорость нормального распространения пла-