

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ОКИСИ АЗОТА ПРИ ТУРБУЛЕНТНОМ ГОРЕНИИ ПРЕДВАРИТЕЛЬНО ПЕРЕМЕШАННОЙ ГАЗОВОЙ СМЕСИ

На базе приближения частичного равновесия и введения предварительно заданной функции плотности вероятности бимодального вида развит метод расчета скорости образования NO при турбулентном горении предварительно перемешанной газовой смеси, учитывающий вызванные хаотическим движением тонкой реакционной зоны пульсации температуры и состава, сверхравновесные концентрации атомов кислорода и потери энергии на излучение. На основании численных результатов проведено сравнение влияния перечисленных факторов на скорость образования окиси азота.

В отличие от диффузионного факела [1, 2] для горения предварительно перемешанной смеси до сих пор не предложено инженерной модели образования окиси азота, учитывающей одновременно влияние турбулентности, сверхравновесной концентрации атомов кислорода и потерь тепла излучением, хотя ряд авторов [3—5] отмечали важную роль указанных факторов. Цель настоящей работы — восполнить этот пробел.

Рассматривается распространение сферически симметричного пламени по перемешанной газовой смеси с известными начальными параметрами турбулентности. Предполагается, что окисление азота не влияет на процесс горения [2], который характеризуется единственной переменной (степенью развития реакции  $g$  [6]) и описывается с помощью  $k-\epsilon$ -модели турбулентности [7] системой из четырех уравнений одинакового общего вида

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\Phi) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 \bar{\rho} \tilde{u} \Phi) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \Gamma_{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right] + S_{\Phi}, \quad (1)$$

где  $t$  — время;  $r$  — радиальная координата;  $\rho$  — плотность; прямая черта сверху означает осреднение по Рейнольдсу, волнистая — по Фавру [7]. Уравнениям неразрывности, горения, переноса турбулентной кинетической энергии  $k$  и скорости ее диссипации  $\epsilon$  отвечают следующие параметры:  $\Phi = (1, \tilde{g}, \tilde{k}, \tilde{\epsilon})$ ,  $\Gamma_{\Phi} = \left( 0, \frac{\mu_t}{St_c}, \frac{\mu_t}{St_k}, \frac{\mu_t}{St_{\epsilon}} \right)$ , где  $\mu_t = C_{\mu} \bar{\rho} \tilde{k}^2 / \tilde{\epsilon}$  [7] — турбулентная вязкость. Константы ( $C_{\mu} = 0,09$ ,  $C_1 = 1,44$ ,  $C_2 = 1,92$ ,  $St_c = 0,9$ ,  $St_k = 1,0$ ,  $St_{\epsilon} = 1,3$ ) и источники в уравнениях  $k-\epsilon$ -модели обычны [7]:

$$S_k = \frac{4}{3} \left[ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial r} - \frac{\tilde{u}}{r} \right]^2 - \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 \tilde{u}) - \bar{\rho} \tilde{\epsilon},$$

$$S_{\epsilon} = C_1 \left\{ \frac{4}{3} \left[ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial r} - \frac{\tilde{u}}{r} \right]^2 - \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 \tilde{u}) \right\} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} - C_2 \bar{\rho} \tilde{\epsilon}^2 / \tilde{k}.$$

Уравнения импульса нет в системе (1) из-за справедливого при малых числах Маха предположения об однородности поля давления  $\left( \frac{\partial p}{\partial r} = 0 \right)$ .

Для осреднения скорости горения  $S_g$  привлекается BML-модель [6], основанная на введении функции плотности вероятности (ФПВ)

$$P(g, r, t) = \alpha(r, t) \delta(g) + \beta(r, t) \delta(1-g) + \gamma(r, t) f(g, r, t)$$

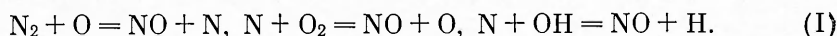
и предположения о том, что свежая смесь ( $g=0$ ) и равновесные продукты сгорания ( $g=1$ ) разделены тонкой ( $\gamma \ll 1$ ) реакционной зоной. Тогда вероятность  $\beta(r, t)$  нахождения в точке  $r$  в момент  $t$  продуктов

$$\beta(r, t) = \bar{\rho} g / \rho_u = \frac{1 + \Delta}{1 + g\Delta} g, \quad (2)$$

где  $\Delta = (T_b/T_u - 1)$ ; индекс  $u$  относится к свежей смеси,  $b$  — к продуктам. Замыкание  $S_g$  при этом включает зависящую от состава смеси константу  $C_3$ , и аналогично результату модели распада вихрей [8] получим:

$$S_g = C_3 \bar{\rho} \tilde{\epsilon} / \tilde{k} g (1 - \tilde{g}). \quad (3)$$

Окисление  $N_2$  описывается классическим механизмом [9, 10]



При условии квазистационарности  $[N]$  скорость образования NO находится из выражения

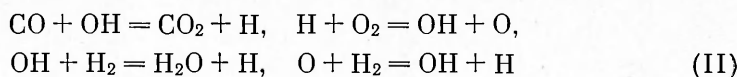
$$W_{NO} = \frac{2K_1 [O] [N_2] - 2 \{K_{-2} [O] + K_{-3} [H]\} b [NO]^2}{1 + b}, \quad (4)$$

где  $b = K_{-1} [NO] \{K_2 [O_2] + K_3 [OH]\}^{-1}$ ;  $K_i$  — константы скорости;  $[A]$  — концентрация  $A$  в моль/м<sup>3</sup>. Резкая зависимость скорости процесса от температуры  $T$ , связанная с большой энергией активации первой реакции, приводит к необходимости учитывать потери тепла при моделировании образования окиси азота. По той же причине окисление  $N_2$  происходит в основном в зоне максимальных температур, т. е. в термодинамически равновесных (кроме NO, N,  $N_2$ ) продуктах сгорания [9]. В пламени, однако, этим продуктам предшествует зона догорания, где концентрация атомов кислорода существенно превышает равновесную, и, несмотря на понижение температуры, скорость образования окиси азота больше [10]  $W_{eq}$ , соответствующей равновесным величинам  $T_{eq}$  и  $[O]_{eq}$ . Предельное ( $[NO] \ll [NO]_{eq}$ ) значение (4) составляет

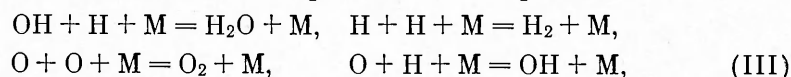
$$W_{eq} = 2K_1 (T_{eq}) [N_2]_{eq} [O]_{eq}.$$

Учет описанного эффекта позволяет в ламинарных условиях моделировать окисление азота при горении бедных и умеренно богатых углеводородно-воздушных смесей с хорошей точностью [10].

Наиболее эффективный метод вычисления  $W_{NO}$  в зоне догорания основан на приближении частичного равновесия [1, 2]. При атмосферном давлении и умеренных отклонениях от стехиометрии по мере приближения к состоянию равновесия скорости бимолекулярных реакций



становятся заметно выше скоростей реакций гибели радикалов



что позволяет, введя предположение о квазиравновесии в реакциях (II), свести задачу нахождения скорости образования окиси азота к расчету термодинамического равновесия при одном свободном параметре. Таким параметром, характеризующим степень отклонения от равновесия, служит линейная комбинация массовых долей  $Y_i$  компонентов [1, 2]

$$c = Y_{H_2} + \frac{1}{2} \frac{M_{H_2}}{M_{OH}} Y_{OH} + \frac{3}{2} \frac{M_{H_2}}{M_H} Y_H + \frac{M_{H_2}}{M_O} Y_O + \frac{M_{H_2}}{M_{CO}} Y_{CO}.$$

Изменения  $c$  определяются только тримолекулярными процессами:

$$W_c = \rho \frac{dc}{dt} = 2M_{H_2} W_{III}, \quad (5)$$

где  $M_A$  — молекулярная масса компонента  $A$ ;  $W_{III}$  — суммарная скорость тримолекулярных реакций, выраженная в моль/(м<sup>3</sup> · с).

Таким образом, при моделировании образования NO в турбулентном пламени наряду со степенью развития реакции  $g$ , характеризующей вероятность нахождения в данной точке равновесных продуктов сгорания,

вводится степень отклонения от равновесия  $c$ . Расчет  $W_{NO}$  при заданной  $c$  в приближении частичного равновесия проводится с учетом вызванных теплотерями изменений энтальпии  $h$  единицы массы газа. Система (1) дополняется уравнениями для  $\Phi = \{\bar{c}, \bar{h}, Y_{NO}\}$ ,  $\Gamma_\Phi = \mu_i/St_c$ .

Для замыкания источников по аналогии с BML-моделью вводится ФПВ

$$P(g, c, h, r, t) = \alpha(r, t)\delta(g)\delta(c)\delta(h - h_u) + \\ + \beta(r, t)\delta(1 - g)\delta(c - \bar{c}_b)\delta(h - \bar{h}_b) + \gamma(r, t)f_2(g, c, h, r, t), \quad (6)$$

где  $\bar{c}_b = \bar{c}/\bar{g}$  и  $h_b$  — условно осредненные по продуктам сгорания величины. Здесь в качестве первого приближения турбулентные пульсации в продуктах сгорания не учитываются по сравнению с пульсациями, связанными с хаотическим движением тонкой реакционной зоны.

Исходя из ФПВ (6), при условии  $\gamma \ll 1$  источники принимают вид

$$S_h = \frac{dp}{dt} - \beta Q(\bar{T}_b, \bar{Y}_{CO_2}^b, \bar{Y}_{H_2O}^b),$$

$$S_c = S_g c_{cr} + \beta W_c(\bar{c}_b, h_b),$$

$$S_{NO} = \beta W_{NO}(\bar{c}_b, \bar{h}_b),$$

где величины  $W_{NO}$ ,  $W_c$  рассчитываются по методу частичного равновесия при  $c = \bar{c}_b$  и  $h = \bar{h}_b$  по формулам (4) и (5) соответственно, то же относится к температуре  $T_b$  и концентрациям  $\bar{Y}_{CO_2}^b, \bar{Y}_{H_2O}^b$ . Среднее по камере сгорания давление  $p(t)$  находится интегрированием уравнения состояния по объему. Вероятность  $\beta$  определяется выражением (2), если вместо  $T_b$  брать условно осредненное значение  $T_b$ . Плотность  $Q$  потерь энергии на излучение вычисляется согласно [1, 2]. При использовании (6) замыкание  $S_g$  (3) изменяется, но этим можно пренебречь [11].

В выражении для  $S_c$  первое слагаемое описывает наработку  $c$  до зоны догорания по аналогии с замыканием (3) средней скорости реакций в пламени. Значение  $c_{cr}$  должно соответствовать локальному максимуму этого параметра в зоне горения, но так как релаксация к равновесию сначала происходит очень быстро, а  $W_{NO}$  не слишком велика, то при расчете концентрации NO допустимо выбирать  $c_{cr}$ , исходя из двух требований: малости скоростей реакций (II) для  $c = c_{cr}$  по сравнению со скоростями гибели радикалов и достижения максимума  $W_{NO}$  при  $c < c_{cr}$ .

С целью иллюстрации работы развитой модели на рис. 1 приведены результаты расчетов эволюции  $\beta$ ,  $\bar{c}_b/c_{eq}$  и  $S_{NO}$  в ходе распространения пламени по метановоздушной смеси в сферической бомбе радиуса  $R = 42,5$  мм с центральным зажиганием. Начальные и граничные условия имеют вид

$$\tilde{u}(r, t = 0) = \tilde{g}(r, 0) = \tilde{c}(r, 0) = \tilde{Y}_{NO}(r, 0) = 0, \tilde{h}(r, 0) = h_0,$$

$$\tilde{k}(r, 0) = u'^2, \tilde{\varepsilon}(r, 0) = \frac{u'^3}{L},$$

$$\tilde{u}|_{r=r_b} = 0, \left. \frac{\partial \tilde{g}}{\partial r} \right|_{r=r_b} = \left. \frac{\partial \tilde{c}}{\partial r} \right|_{r=r_b} = \left. \frac{\partial \tilde{Y}_{NO}}{\partial r} \right|_{r=r_b} = \left. \frac{\partial \tilde{h}}{\partial r} \right|_{r=r_b} = \left. \frac{\partial \tilde{k}}{\partial r} \right|_{r=r_b} = \left. \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial r} \right|_{r=r_b} = 0,$$

$u' = 1$  м/с и  $l = 10$  мм — пульсационная скорость и масштаб турбулентности, начальная энтальпия  $h_0$  соответствует нормальным условиям и стехиометрическому соотношению компонентов,  $r_b = \{0, R\}$ . При вычислениях сделано предположение  $\bar{h}_b = \bar{h}_u = \bar{h}$ , константы скоростей взяты из [12].

На рис. 2 для тех же условий проведено сравнение влияния различных факторов на локальную ( $S_{NO}$ ) и суммарную по камере сгорания ( $W_{sum}$ ) скорости образования окиси азота. Видно, что расчеты  $S_{NO}$  как по равновесной концентрации атомов кислорода (кривая 2), так и по средней температуре (3) значительно занижают скорость окисления азота, в последнем случае эффект выражен сильнее при малых  $g$ , но исче-

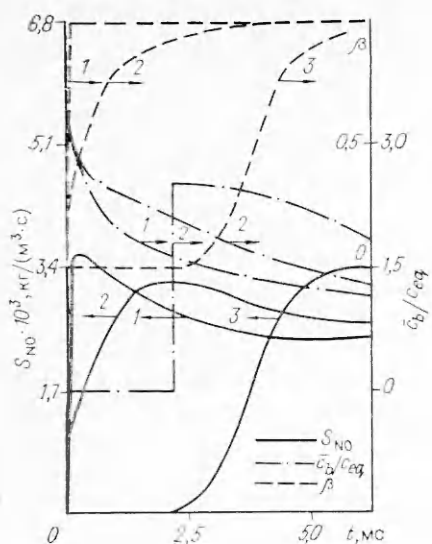


Рис. 1. Эволюция вероятности  $\beta$  нахождения продуктов сгорания, степени отклонения продуктов от равновесия ( $\bar{c}_b/\bar{c}_{eq}$ ) и средней скорости  $S_{NO}$  образования окиси азота в ходе распространения пламени.

$r/R$ : 1 — 0, 2 — 0,1, 3 — 0,2, 4 — 0,265.

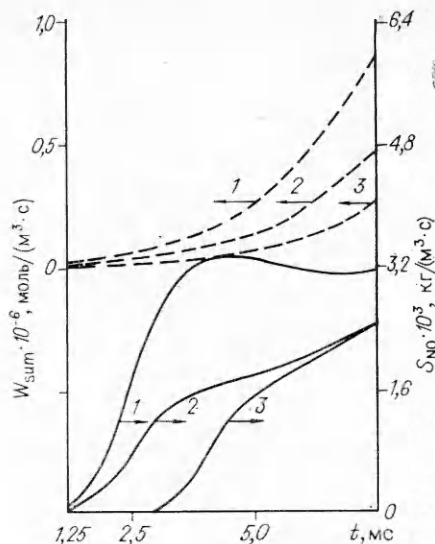


Рис. 2. Сравнение воздействия различных факторов на локальную ( $S_{NO}$ ) и суммарную по камере сгорания ( $W_{sum}$ ) скорости образования окиси азота.

1 —  $S_{NO} = \beta W_{NO}(\bar{c}_b, \bar{h}_b)$  и  $Q = 0$ ; 2 —  $S_{NO} = \beta W_{eq}(T_{eq}, [O]_{eq})$  и  $Q = 0$ ; 3 —  $S_{NO} = W_{eq} \times (T, [O]_{eq})$  и  $Q = 0$ .

зает по мере приближения  $g$  к единице. Роль потерь энергии на излучение в рассматриваемых условиях существенно слабее.

Итак, исходя из приближения частичного равновесия и введения предварительно заданной ФПВ бимодального вида развит метод расчета скорости образования NO при турбулентном горении предварительно перемешанной газовой смеси, учитывающий вызванные хаотическим движением тонкой реакционной зоны пульсации температуры и состава, сверхравновесные концентрации атомов кислорода и потери энергии излучением.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Бурико Ю. Я. Исследование образования окиси азота в турбулентных пламенах струйного типа: Дис. ... канд. физ.-мат. наук.— М., 1984.
2. Кузнецов В. Р., Сабельников В. А. Турбулентность и горение.— М.: Наука, 1986.
3. Moss J. V., Bray K. N. C. A statistical model of NO formation in premixed turbulent flames: Proc. Deuxieme Symp. European sur le Combust. The Combust. Inst. Section Francaise.— Chatillon, 1975.— P. 315—332.
4. Moreau P., Borghi R. Experimental and theoretical studies of nitrogen oxide formation in a turbulent premixed flame // J. Energy.— 1981.— 5, N 3.— P. 152—157.
5. Pope S. V. Monte Carlo calculations of premixed turbulent flames // 18th Symp. (Int.) on Combustion. The Combust. Inst., Pittsburgh, 1981.— P. 1001—1010.
6. Турбулентные течения реагирующих газов/Под ред. П. А. Либби, Ф. А. Вильямса.— М.: Мир, 1983.
7. Методы расчета турбулентных течений/Под ред. В. Колльмана.— М.: Мир, 1984.
8. Mason H. V., Spalding D. V. Prediction of reaction rates in turbulent premixed boundary-layer flows. The Combust. Inst. European Symp./Ed. F. J. Weinberg.— N. Y.: Acad. Press, 1973.— P. 604—606.
9. Зельдович Я. Б., Садовников П. Я., Франк-Каменецкий Д. А. Окисление азота при горении.— М.: Изд-во АН СССР, 1947.
10. Bowman C. T. Investigation of nitric oxide formation kinetics in combustion processes: the hydrogen — oxygen — nitrogen // Combust. Sci. Technol.— 1971.— 3, N 1.— P. 37—45.
11. Липатников А. Н., Назаров И. П., Простов В. П. Учет потерь тепла при моделировании турбулентного горения предварительно перемешанной смеси // ФГВ.— 1988.— 24, № 3.— С. 32—35.
12. Ay J., Sichel M. Theoretical analysis of NO formation near the primary reaction zone in methane combustion // Combust. Flame.— 1976.— 26, N 1.— P. 1—15.

г. Долгопрудный