

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАГИРУЮЩИХ ТЕЧЕНИЙ НА БАЗЕ РЕАКТОРНОГО ПОДХОДА

Крюков¹ В.Г., Наумов² .В.И., Абдуллин³ А.Л., Демин⁴ А.В., Исакова¹ Р.Л.

Казанский Государственный Технический Университет – КГТУ
ул. К. Маркса, дом 10, г. Казань, 420111

- ¹ - кафедра Автомобильных Двигателей и Сервиса, vkrujkov@kai.ru
² - кафедра Автомобильных Двигателей и Сервиса, nvi2000@mail.ru
³ - кафедра Автомобильных Двигателей и Сервиса, ala2000@mail.ru
⁴ - кафедра Промышленной экологии, alexdemv@mi.ru

Аннотация. Работа посвящена моделированию процессов горения в рабочих объемах узлов двигателей и тепловых установок. Используется реакторный подход, когда на основе уравнений движений или полуэмпирических моделей течений формируются размеры реакторов, на которые делятся рабочие объемы, а также тепло-массообменные характеристики между ними. Каждый реактор рассматривается как гомогенная зона с переменными параметрами (состав, температура, объем, давление), в которой протекают химические реакции. Изменение состава описывается уравнениями химической кинетики в экспоненциальной форме, а массообменные процессы (конвективные потоки, испарение, диффузия, конденсация и т.д.) отражаются в реакциях массообмена. Реакторный подход реализован в инвариантном программном комплексе NERCHIM с преобразованием символьных химических реакций в уравнения кинетики, и с их последующим интегрированием по методу Пирумова. Подробно изложены некоторые модели (реагирующие газожидкостные течения, процессы в соплах, горение распыленного угля), созданные на базе реакторного подхода, включая сравнение с экспериментальными данными и численные исследования.

Ключевые слова: математическое моделирование, горение, реактор, химическая кинетика, массообмен, инвариантная программа.

Abstract. The methodology of simulation of combustion and flow in engine and power generation systems is developed. Use is made of a reactor approach when the working volume is divided in reactors on the ground of equations of motion or semi-empirical models for fluid flow. Each reactor is interpreted as a zone with uniform nonstationary parameters (chemical composition, pressure, temperature, volume, etc.) in which chemical reactions proceed. Neighbor reactors could have energy- and mass-exchange. Change of chemical composition of working medium in each reactor is described by equations of chemical kinetics derived in exponential form. Mass-exchange processes between neighbor reactors such as mass input from neighbor reactors, evaporation, diffusion, condensation are simulated by “reactions of mass-exchange”. Condensed compounds of combustion products are represented by “large molecules”. Reactor approach is realized in invariant computer codes (NERCHIM) with conversion of symbolic chemical reactions into the equations of chemical kinetics, with integration using implicit scheme of Pirumov. The comparison with numerical data of other authors is demonstrated. A detailed description of the following models, developed on the basis of reactor approach is presented: model of reacting gas-liquid flow; model of reacting flow in nozzle and model of pulverized coal combustion. The comparison of experimental and numerical results is shown.

Обозначения

A – площадь сечения канала (сопла)

A_j, n_j, E_j - параметры константы скорости j -ой реакции

$A_I, A_S, a_1, \dots, a_7$ - коэффициенты аппроксимации энтальпии и энтропии

a_{ki} – число атомов k -го типа в i -ом веществе

a_s – температура в центре капли

b_{IT} – число атомов i -го типа в условной формуле топлива

b_s – разность $T_s - a_s$

C_i - молярная концентрация i -ого вещества

C_{pi}^{rf} - “опорное” значение молярной теплоемкости i -го вещества

C_{xs} – коэффициент трения

c_s – теплоемкость s -ой фракции частицы

c_p – массовая теплоемкость газовой фазы

c_p^{vm} - средняя теплоемкость в приведенной пленке

\bar{c} - теплоемкость угля

D_v – коэффициент диффузии

\bar{d}_p - средний диаметр частиц конденсата

d_p - диаметр частицы

F_s - число капель s -ой группы, проходящих через канал в единицу времени

G_g – расход газа на единицу площади канала

G_m - расход газовой фазы

G_p – расход угля

\bar{G}_s - относительный расход s -ой группы капель (п.2); относительный расход s -ой фракции угля (п.4)

G_Σ - расход газожидкостной смеси (п.2), расход газоугольного потока (п.4)

g_i – массовая доля i -ого вещества

g_{R_i} - массовая доля i -го вещества примеси

g_{V_i} - массовая доля i -го летучего вещества

H_i - молярная энтальпия i -ого вещества

H_i^{rf} - “опорное” значение молярной энтальпии i -ого вещества

h –массовая энтальпия

h_n – шаг интегрирования

h_s – средняя энтальпия частиц s -ой группы (п.2); энтальпия s -ой фракции угля (п.4)

h_m - энтальпия газа

h_m^*, h_s^* - энтальпии торможения газа и жидкости

h_R – удельная энтальпия жидкости на поверхности капли

h_T – энтальпия топлива

h_Σ - начальная энтальпия для всего течения

$I_{ид}$ - значение идеального удельного импульса

$I_{yд}$ - значение реального удельного импульса

J_h – максимально допустимое количество приближений на шаге интегрирования

J_n - количество итераций на n -ом шаге интегрирования

J_p - допустимое количество приближений без пересчета матрицы частных производных

K_j - константа равновесия j -ой реакции
 k_j - константа скорости j -ой реакции
 k_p – число групп капель (п.2), число групп частиц (п.3)
 L_v – скрытая теплота испарения
 L_V - теплота образования летучих веществ
 m_b - число обратимых химических реакций
 \dot{m} - массовый расход
 m_s – масса s -ой группы капель
 n_b - общее число реагирующих веществ
 n_f – средний коэффициент адиабатного расширения
 P – давление
 P_{O_2} - парциальное давление кислорода
 P_v – давление насыщенных паров
 R – радиус частицы
 R_0 – универсальная газовая постоянная
 R_s – радиус s -ой группы капель
 r - текущий радиус-координата.
 r_b - число реакций массообмена
 r_i - мольная доля i -ого вещества
 r_M – радиус минимального сечения сопла
 S^0 – мольная энтропия при 1-ой атмосфере
 T, T_m, T_g – температура реагирующей среды
 T_c – средняя температура конденсированных частиц
 T_p – температура частицы
 T_{rf} - “опорное” значение температуры
 \bar{T}_w - фактор теплообмена
 V - объем
 V_m, V_g – скорость газа
 V_s – скорость s -ой группы капель
 V_x - осевая скорость газовой фазы
 V_y - радиальная скорость газовой фазы
 W_c – средняя скорость конденсированных частиц
 W_x - осевая скорость конденсата
 W_y - радиальная скорость конденсата
 x_k, Y_k – координаты профиля сопла
 x – линейная координата
 z – массовая доля конденсированной фазы
 α_{ox} - коэффициент избытка окислителя
 γ - изменение удельного объема вещества при испарении
 Δ_x – максимально допустимое изменение неизвестной на шаге интегрирования
 ΔH_{y_2} - высшая теплотворная способность угля
 $\Delta H_{CO}^+, \Delta H_{CO_2}^+$ - абсолютные величины теплот образования веществ CO и CO_2
 δ_v^* - толщина приведенной пленки
 δr_k - ошибка расчета по атому k -того типа

δr_m - средняя ошибка расчета по атомам
 ε - степень черноты стенок канала
 ε_N - максимально допустимая ошибка для завершения итераций на шаге интегрирования
 $\zeta_{дв}$ – потери удельного импульса из-за отставания конденсированной фазы
 $\zeta_{кс}$ –потери удельного импульса из-за выпадения конденсата на стенку
 $\zeta_{нп}$ – потери удельного импульса из-за непараллельности
 $\zeta_{нр}$ - потери удельного импульса из-за химической неравновесности
 $\zeta_{тр}$ - потери удельного импульса из-за трения
 λ_{vm} - средняя теплопроводность в приведенной пленке
 μ_C – молекулярная масса углерода
 μ_i – молекулярная масса i -ого вещества
 μ_m, μ_g – средняя молекулярная масса газовой фазы
 μ_v – молекулярная масса пара
 ρ – плотность
 ρ_m – плотность газовой фазы
 ρ_s – плотность капель s -ой группы (п.2); плотность s -ой фракции частицы (п.4)
 $\sigma, \varepsilon/k$ - потенциальные параметры Леннарда-Джонса
 τ - время
 v'_{ij}, v''_{ij} - стехиометрические коэффициенты i -го вещества в j -ой реакции
 v_{ij}, n_{ij} – приведенные стехиометрические коэффициенты реакций
 Φ_s - теплосодержание s -ой группы капель
 $\bar{\Phi}_s$ - относительное теплосодержание s -ой группы капель
 φ – степень образования CO_2 при горении угля

Индексы

+ - прямое направление реакции
 – - обратное направление реакции
 * - “большая” молекула
 0 – начальное значение
 a – выходное сечение сопла
 C – углерод (п.4)
 c – конденсат (п.3)
 f – выходное значение
 g, m – газ
 kr – критический параметр
 m – минимальное сечение сопла
 min – минимальное значение
 max – максимальное значение
 $ос$ - вход в сопло
 p - частица
 r – поверхность капли (п.2); инертные примеси (п.4)
 rf – “опорное” значение
 s – номер группы капель (п.2); фракция частицы угля (п.4)
 T - топливо
 V - летучие вещества
 v - пар
 vm - парогаз

Введение: Газодинамический и реакторный подходы

Известно, что процессы горения, протекающие в узлах реальных установок (камера сгорания, газогенераторы, сопла, топки) являются сложными для математического моделирования, т.к. включают множество взаимодействующих явлений (химические реакции, турбулентность, диффузия, тепломассоперенос, освобождение энергии) в неоднородной среде [1]. Анализируя доступную библиографию можно выделить два направления моделирования процессов в узлах установок:

а) газодинамическое, в рамках которого после решения проблем многомерности течений, развиваются модели процессов горения [2,3,4] как правило, используя понятия: «мгновенное реагирование при смешении» или «суммарная реакция». В то же время опубликовано мало работ (например, [5,6]), где при 2-3х мерном моделировании течений вовлекается детальная химическая кинетика. Одна из таких работ [5] моделирует 3-х мерное течение с 26 веществами и 55 химическими реакциями, используя вычислительные ресурсы нескольких исследовательских центров, т.к. требуется чрезмерно большой объем расчетов;

в) химико-кинетическое, в среде которого после решения проблемы моделирования сложных реагирующих систем (например, [7,8]) развиваются модели, учитывающие неоднородность реагирующего объема, включая реакторный подход. В настоящее время учет 500 и более элементарных реакций в однородной среде не является удивительным. Так, например, в работе [9] был сформирован детальный механизм горения керосина и n-декана (со сложной стадией их пиролиза), состоящей из 193 веществ и 1085 реакций. Для исследования этого механизма и его обоснования использовалась собственная инвариантная программа [8]. В работе [10] для расчета процессов в газогенераторе (богатая смесь гидрокарбонатов с кислородом) был разработан и использован механизм, который учитывал 107 веществ и 642 реакции. Математическая модель газогенератора включала 2 реактора идеального смешения. Влияние испарения капель на процессы горения учитывалось уменьшением времени пребывания реагирующей смеси во втором реакторе.

В рамках реакторного подхода авторами настоящей статьи было сформировано некоторое “ядро” моделирования, т.е. набор математических алгоритмических и программных компонентов, которые являются общими для создания математических моделей и программ расчета процессов в различных типах высокотемпературных агрегатов. В частности, были созданы модели и программа расчета:

- горение в адиабатном реакторе;
- процессов в баках горячего наддува;
- процессов горения в газогенераторах;
- реагирующих течений в соплах двигателей;
- горения распыленного угля в потоке;
- ламинарного фронта пламени;
- реагирующего пограничного слоя;
- расчет реагирующего газожидкостного течения в рециркуляционной зоне.

Созданные программы являются инвариантными относительно реагирующей среды (т.е. набора веществ и механизма химических реакций) и они образуют пакет программ, называемый NERCHIM. Самую простую из этих программ (ADIABAT) будем называть также базовой программой.

В настоящей работе излагаются:

а) основные компоненты “ядра” моделирования и краткое описание базовой программы (раздел 1);

б) математические модели и численные примеры расчета:

- газожидкостного реагирующего течения (раздел 2);
- реагирующих двухфазных течений в соплах двигателей (раздел 3);

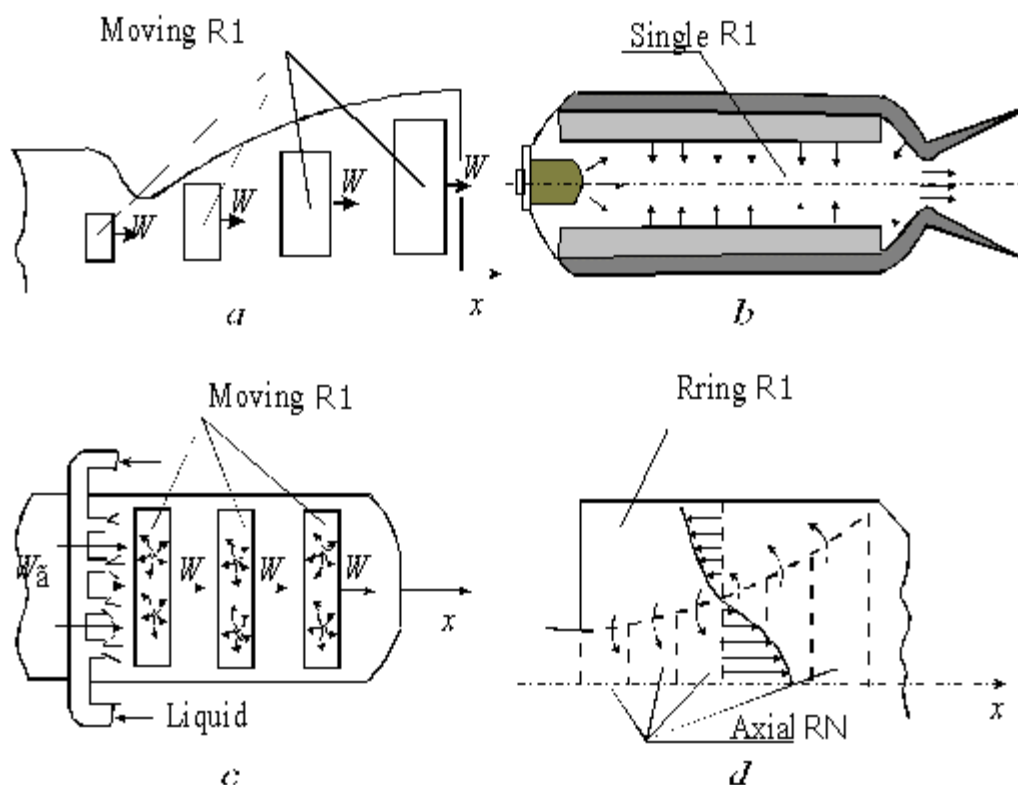
- горения распыленного угля в потоке (раздел 4).

1. Основные фрагменты базовой модели.

В этом разделе описываются основные фрагменты “ядра” моделирования, а именно: физическая схематизация процессов, уравнения химической кинетики, реакции массообмена, метод «больших молекул», алгоритм расчета и базовая программа.

1.1. Физическая схематизация процессов

Основная идея реакторного подхода заключается в разделении моделируемого рабочего объема на реакторы (гомогенные зоны) с однородным распределением параметров. Предполагается, что геометрия реакторов может быть определена посредством: расчета по традиционным уравнениям движения [1] по полуэмпирическим уравнениям теории струй [11] или даже по некоторым эмпирическим соотношениям [12]. В принципе каждый реактор можно ассоциировать с одной газодинамической ячейкой и тогда мы приходим к слиянию газодинамического и реакторного подхода. Но для многомерных течений это приведет к огромным вычислительным затратам. Одиночный реактор (R1) можно рассматривать, как гомогенную реагирующую среду переменного объема, который может обмениваться теплом и массой с внешней средой, изменять по времени параметры состояния (температура, масса, давление) и даже двигаться. В системе реакторов (SR) каждый реактор связан с другими (соседними реакторами) посредством тепло-массообмена, однако имеет собственные параметры состояния.



Фигура 1 Применение реакторного подхода к моделированию процессов горения.

На Фиг. 1 показаны примеры применения реакторного подхода к созданию физических схем горения и течения: продуктов сгорания в соплах ракетных двигателей (а); в камере сгорания РДТТ (b); в газогенераторе «газ + жидкость» (c); в рециркуляционной зоне (d).

1.2. Уравнения химической кинетики

В общем случае в реакторе R1 или в одном реакторе системы SR протекают обратимые химические реакции, представленные в форме:



Константы скорости прямых реакций k_j^+ являются функцией температуры и обычно выражаются формулой Аррениуса:

$$k_j^+ = A_j^+ T^{n_j^+} \exp(-E_j^+ / R_o T) \quad (2)$$

Тогда константы скоростей обратных реакций определяются с помощью констант равновесия K_j по соотношениям:

$$k_j^- = k_j^+ / K_j ; \quad (3)$$

Для упрощения записи уравнений представим каждую обратимую реакцию как набор двух необратимых реакций (прямой и обратной). Кроме того, введем в рассмотрение “реакции” массообмена (п.1.3). Тогда можно следующим образом преобразовать стехиометрические коэффициенты:

$$\begin{aligned} \nu_{ij} &= \nu''_{is} - \nu'_{is} ; & n_{ij} &= \nu'_{is} , & j &= s , & s &= 1, \dots, m_b , \\ \nu_{ij} &= \nu'_{is} - \nu''_{is} ; & n_{ij} &= \nu''_{is} , & j &= s + m_b , & s &= 1, \dots, m_b , \\ \nu_{ij} &= \nu''_{is} - \nu'_{is} ; & n_{ij} &= \nu'_{is} , & j &= s + m_b , & s &= (m_b + 1), \dots, (m_b + r_b) . \end{aligned} \quad (4)$$

Согласно этим обозначениям прямые реакции имеют индексы $j = 1, \dots, m_b$, обратные реакции – индексы $j = m_b + 1, \dots, 2m_b$, и для реакций массообмена $j = 2m_b + 1, \dots, 2m_b + r_b$. Тогда начальные формы уравнений для каждого реактора, учитывая, что его объем может меняться [13], представляются в виде:

$$\frac{1}{V} \frac{dn_i}{d\tau} = \sum_j \nu_{ij} k_j \left(\prod_p C_p^{n_{pj}} \right) C^{m_j} ; \quad i, p = 1 \dots n_b ; \quad j = 1 \dots (2m_b + r_b) \quad (5)$$

где n_i - число молей i -го вещества в объеме V ; C – концентрация реагирующей смеси.

Замена в уравнениях (5) концентраций на мольные доли r_i [14], приведет к следующим соотношениям:

$$\frac{dr_i}{d\tau} = \sum_j \nu_{ij} k_j \left(\frac{P}{R_o T} \right)^{\bar{m}_j} \prod_p r_p^{n_{pj}} - r_i \sum_q \sum_j \nu_{qj} k_j \left(\frac{P}{R_o T} \right)^{\bar{m}_j} \prod_p r_p^{n_{pj}} ; \quad (6)$$

где: $i, p, q = 1 \dots n_b$; $j = 1 \dots 2m_b + r_b$; $\bar{m}_j = \sum n_{pj} + m_j - 1$; m_j – признак участия в реакции j каталитической частицы M ($m_j = 1$ если частица M участвует в j -ой реакции; $m_j = 0$ – в противном случае).

Уравнения (6) являются нелинейными ОДУ, которые интегрируются только численными методами. При этом малые значения r_i , из-за ошибок конечно-разностной аппроксимации, могут стать отрицательными, что не имеет физического смысла. В то же время ограничения снизу типа $r_i \geq 10^{-7}$ вызовет ошибочно высокие скорости реакций с участием радикалов, фиктивный подвод в реагирующую смесь и как следствие искажение характеристик горения. Для устранения этих затруднений в уравнениях (6) выполняется замена $\gamma_i = -\ln r_i$ в результате которой получим соотношения:

$$\frac{d\gamma_i}{d\tau} = -e^{\gamma_i} \sum_j v_{ij} \Omega_j + \sum_q \sum_j v_{qj} \Omega_j \equiv f_{\gamma_i}; \quad i, p, q = 1, \dots, n_b; \quad j = 1, \dots, 2m_b + r_b \quad (7)$$

где: $\Omega_j = k_j (P / R_0 T)^{\bar{m}_j} \exp\left(-\sum_p n_{pj} \gamma_p\right)$.

При использовании мольно-массовых долей ($\xi_i = g_i / \mu_i$) вместо мольных долей из уравнений (5) несложно получить (с заменой $\gamma_i = \ln \xi_i$) следующие уравнения:

$$\frac{d\gamma_i}{d\tau} = -e^{\gamma_i} \sum_j v_{ij} \Omega_j + \sum_q \mu_q \sum_j v_{qj} \Omega_j \equiv f_{\gamma_i}; \quad i = 1, \dots, n_b; \quad j = 1, \dots, 2m_b + r_b; \quad (8)$$

где: $\Omega_j = k_j (\rho)^{\bar{m}_j} \left(\sum_p \exp(-\gamma_p)\right)^{m_j} \exp\left(-\sum_p n_{pj} \gamma_p\right)$.

1.3. Реакции массообмена

Применение этих условных реакций упрощает моделирование процессов в реакторах R1 или SR при подводе или отводе массы в ходе горения. Тогда математические модели и алгоритмы расчета становятся более «гибкими» относительно массообменных процессов: внутри реакторов, с окружающей средой, а также между реакторами. Но для этого реакции массообмена должны быть представлены в символьной форме химических реакций и их константы скоростей должны соответствовать закону действующих масс. При этом символьная форма этих реакций может отличаться от традиционной (ввиду отсутствия сохранения атомов) и форма константы скорости будет отличаться от Аррениусовой, определяясь уравнениями, описывающими массообмен. Приведем некоторые примеры:

а) Подвод газообразных веществ из реактора R1 в реактор R2 с общим расходом $\dot{m}_{1,2}$ можно рассматривать как результат протекания n_b «реакций» массоподвода $\rightarrow B_i$. Так как эти «реакции» имеют нулевой порядок, то получим:

$$W_{i2}^+ \equiv k_{i2}^+ C_{i1}^0 = \frac{\dot{m}_{1,2i}}{\mu_i V_2} = \frac{\dot{m}_{1,2} g_{i1}}{\mu_i V_2} = \frac{\dot{m}_{1,2} r_{i1}}{\mu_{m1} V_2}, \quad i = 1, \dots, n_b, \quad (9)$$

в) Допустим, что в реакторе объема V находятся N капель некоторой жидкости (Q) с массой m_q каждая и эта жидкость испаряется в соответствии с известным уравнением [15]:

$$\frac{dm_q}{d\tau} = 4\pi R_q \frac{D_v \mu_q P}{\delta_v^* R_o T} \ln\left(1 - \frac{P_{vq}}{P}\right) \quad (10)$$

Тогда механизм реакций можно дополнить “реакцией” массоподвода $\rightarrow Q$ с константой скорости:

$$k^+ = - \frac{0,001N(dm_q/d\tau)}{\mu_q V(1-m_q N)} \quad (11)$$

с) Допустим, что в некотором реакторе в ходе химических реакций в газовой фазе образуется вещество Q , которое частично конденсируется в объеме или на стенке реактора в виде микрокапель с массовой скоростью \dot{m}_q , которая пропорциональна концентрации C_q . Тогда для описания этого процесса в механизм реакций следует ввести “реакцию” массоотвода первого порядка ($Q \rightarrow$) с константой:

$$k^- = \frac{0,001\dot{m}_q}{\rho_q V}; \quad (12)$$

1.4. Метод больших молекул

Известно, что продукты сгорания могут включать кроме газообразных также конденсированные вещества, для расчета которых при химическом равновесии используется строгие термодинамические уравнения, представленные, например, в [16]. Однако ввиду сложности алгоритма расчета существует альтернативный метод прогнозирования конденсированной фазы. Так для химически равновесных систем в работе [17] использовалось понятие «одионой конденсированной молекулы» в предположении, что конденсат находится в продуктах сгорания в виде отдельных молекул. Однако эту идею можно использовать лишь при небольшом содержании конденсата, т.к. его высокая дисперсность приводит к значительной погрешности при расчете.

Этот недостаток устраняется в методе “больших молекул” (БМ), предложенном Худяковым [18]. Согласно этому методу предполагается, что частицы конденсированного вещества являются «большими молекулами», состоящими из некоторого количества (n^*) обычных молекул (как правило, $n^* = 1000$). Совокупность БМ рассматривается как индивидуальное газовое вещество B_j^* с термодинамическими свойствами конденсата. Например, для конденсированной фазы Al_2O_3 с числом атомов в молекуле $a_{ij} = (2,3)$, при $n^* = 1000$ получим $a_{ij}^* = (2000; 3000)$, то есть химическая формула БМ этого вещества будет $Al_{2000}O_{3000} \equiv Al_2O_3^*$. Тогда значения термодинамических функций для БМ следует определять по формулам: $H_i^* = H_{is} n^*$; $S_i^{0*} = S_{is}^0 n^*$. Для расчета констант диссоциации БМ формально используются такие же формулы, как для газообразных веществ:

$$\ln K_i^* = \frac{\sum_k a_{ki}^* S_k^o - S_i^{o*}}{R_0} - \frac{\sum_k a_{ki}^* H_k - H_i^*}{R_0 T} \quad (13)$$

При расчетах реагирующая среда может включать как обычные, так и «большие молекулы» одного и того же вещества. В результате в рамках метода БМ уравнения равновесия для газообразных и конденсированных веществ записываются в одной и той же форме. При решении многих практических задач такого рода инвариантность нередко допускают и для других соотношений (уравнение состояния, уравнения газовой динамики и т.д.), благодаря чему удается без существенных изменений перенести алгоритм расчета,

созданный для гомогенных продуктов сгорания, на гетерогенные смеси. Поэтому вполне естественно попытаться применить метод БМ для моделирования процессов в неравновесных системах. Анализ свойств и особенностей этих систем показывает, что существо адаптации метода БМ заключается:

- во введении в механизм химических превращений каких либо взаимодействий с участием БМ;
- в установлении соответствия дополнений в системе уравнений изменения состава (7) основным положениям химической кинетики;
- в получении формул для расчета констант скоростей этих реакций;
- в учете особенностей термодинамических свойств «газа» БМ.

Так осаждение газообразных молекул V_2O_3 на поверхности конденсированных частиц $V_2O_3^*$ можно представить реакцией:



Эту реакцию следует интерпретировать следующим образом: в результате конденсации молекулы V_2O_3 на «большой молекуле» $V_2O_3^*$ последняя сохранила самое себя ($n^* = 1000$) и от нее «отпочковалась» тысячная доля БМ. Дробные значения коэффициентов обусловлены необходимостью соблюдения материального баланса в реакциях с участием БМ. Некоторая необычность записи реакции вызвана требованием согласования метода БМ с положениями формальной химической кинетики. В результате алгоритмы и программы расчета химически неравновесных процессов для газовых сред могут быть перенесены на гетерогенные системы.

Известно, что некоторые типы газообразных молекул адсорбируются на частицах конденсата и при благоприятных условиях могут вступать между собой в химические реакции. Например, образование конденсированного углерода из CO при высоких температурах можно представить следующей реакцией:



Если дополнить механизм химического взаимодействия реакциями типа (14, 15), то в уравнениях химической кинетики должны появиться слагаемые, отражающие эти реакции. Например, если учесть реакцию (15), то уравнение изменения CO дополнится слагаемыми:

$$-2k_a^+ \left(\frac{P}{R_0 T} \right) r_{CO}^2 + 2k_a^- \left(\frac{P}{R_0 T} \right)^{0,001} r_{CO_2} r_{C^*}^{0,001} \quad (16)$$

Необходимо дополнить также уравнение для изменения CO_2 и появится еще одно уравнение для изменения C^* . Следует отметить, что в инвариантных программах расчета эти изменения будут выполнены автоматически. Более подробно метод БМ в применении к химически неравновесным процессам изложен в [14].

1.5 Уравнения сопутствующих процессов

Как правило, в математической модели каждого реактора вместе с уравнениями химической кинетики используются и другие соотношения, которые мы будем называть сопутствующими уравнениями. В частности, во многих моделях (см. п.2, п.3, п.4)

используется калорическое уравнение, связывающее энтальпию, температуру и состав реагирующей смеси:

$$h = \sum_i H_i r_i / \sum_i \mu_i r_i. \quad (17)$$

Мольные энтальпии индивидуальных веществ H_i являются функциями температуры и аппроксимируются для газов в интервале 300К-5000К, например, в базе ТТІ [16] используется формула:

$$H(T) = a_1 + \sum_{q=1}^7 a_q X^q, \quad (18)$$

где $X=10^{-3}T$.

В других известных базах данных по веществам [17, 19] энтальпии вычисляются по формуле:

$$\frac{H(T)}{R_o T} = a_1 + \frac{a_2}{2} T + \frac{a_3}{3} T^2 + \frac{a_4}{4} T^3 + \frac{a_5}{5} T^4 + \frac{a_6}{T} \quad (19)$$

на двух температурных интервалах: 300К ÷ 1000К и 1000К ÷ 5000К

Для уменьшения объема вычислений в нашей базовой модели уравнение (17) представляется в линеаризованной форме:

$$F_T \equiv T - T_{rf} - \sum_i (h \mu_i - H_i^{rf}) r_i / \sum_i C_{pi}^{rf} r_i = 0 \quad (20)$$

где значения “опорных” параметров H_i^{rf} , C_{pi}^{rf} определяются по формулам (18) или (19) с шагом $\Delta T = 100\text{К}$, что обеспечивает достаточную точность для большинства практически интересных проблем. Система уравнений (7) вместе с уравнением (20) в отсутствии массообмена и теплообмена с внешней средой образует модель адиабатического реактора (при $P, h = \text{const}$).

Для другой известной задачи (одномерное течение химически неравновесной реагирующей смеси по соплу, п.3) при задании зависимости $\varphi_x = -\ln(P(x)/P_{oc})$, кроме соотношения (20), уравнениями сопутствующего процесса будут:

$$\frac{dV_m}{d\tau} = \frac{R_o T}{\mu_m} \left(\frac{d\varphi_x}{dx} \right); \quad \frac{dx}{d\tau} = V_m; \quad h = h_{oc} - \frac{V_m^2}{2}; \quad (21)$$

В этой модели предполагается, что реактор движется по соплу со скоростью газа.

1.6 Алгоритм решения

Алгоритм решения для всех созданных моделей является общим и использует неявно-разностный метод Пирумова [20], когда дифференциальные уравнения модели на каждом шаге интегрирования представляются в конечно-разностной форме. Например, для уравнений химической кинетики имеем:

$$F_i^{n+1} \equiv \gamma_i^{n+1} - \gamma_i^n - h_n (\theta f_i(\langle \gamma_k^n \rangle) + (1 - \theta) f_i(\langle \gamma_k^{n+1} \rangle)) = 0 \quad (22)$$

где: $\langle \gamma_k \rangle \equiv \gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{n_s}$ и $\theta = 0, 4 \dots 0, 5$.

Дифференциальные уравнения сопутствующих процессов также представляются в форме (22), а алгебраические, например, (20) остаются без изменений. Решение полученной системы выполняется методом Ньютона на каждом шаге интегрирования. Например, для задачи адиабатического реактора неизвестные значения γ_i^{n+1}, T^{n+1} определяются по соотношениям (с некоторым начальным приближением):

$$x_k^{n+1, m+1} = x_k^{n+1, m} - \Delta x_k^{m+1} \quad (23)$$

где Δx_k^{m+1} определяется в ходе решения системы уравнений

$$\left[\frac{\partial F_i}{\partial x_k} \right] \Delta x_k^{m+1} = -F_i^m \quad x = \gamma_i, T; \quad i, k = 1, \dots, (n_b + 1) \quad (24)$$

Перед началом итераций выполняется LU-декомпозиция якобиана [21], т.е. его разложение на произведение верхней и нижней треугольных матриц. Эта LU-матрица используется на нескольких шагах интегрирования ("замороженная" схема). Основные частные производные вычисляются аналитически, например:

$$\frac{\partial F_i}{\partial \gamma_k} = \delta_i^k + h_n (1 - \theta) \left[e^{\gamma_i} \sum_j v_{ij} (\delta_i^k - n_{kj}) \Omega_j - \sum_p \sum_j v_{pj} n_{kj} \Omega_j \right] \quad (25)$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial T} = h_n (1 - \theta) \left[e^{\gamma_i} \sum_j v_{ij} \Omega_j \left(\frac{n_j - \bar{m}_j}{T} + \frac{E_j}{R_o T^2} \right) - \sum_p \sum_j v_{pj} \Omega_j \left(\frac{n_j - \bar{m}_j}{T} + \frac{E_j}{R_o T^2} \right) \right] \quad (26)$$

$$\frac{\partial F_T}{\partial \gamma_k} = \left[(h \mu_k - H_k^{rf}) r_k - C_{pk}^{rf} r_k (T - T_{rf}) \right] / \sum_q C_{pq}^{rf} r_q; \quad i, k, p = 1, \dots, n_b; \quad j = 1, \dots, 2m_b + r_b \quad (27)$$

что в отличие от численного определения производных позволяет сохранять замороженную LU-матрицу на большем числе шагов. Кроме того, частные производные (25, 26) для уравнений в экспоненциальной форме (7) требуют меньшего объема расчетов, т.к. используются значения Ω_j уже вычисленные при определении правых частей уравнений (7). В алгоритме в ходе расчета помимо основных характеристик подсчитываются следующие параметры:

- количество итераций на n -ом шаге интегрирования J_n ;
- максимальное относительное изменение значений x_i между итерациями на шаге интегрирования $\varepsilon = \max_i \left| \Delta x_i^{m+1} / x_i^n \right|; \quad i = 1, \dots, n_b$;

- максимальное относительное изменение значения неизвестных x_i на шаге интегрирования $\Delta = \max_i \left| (x_i^{n+1} - x_i^n) / x_i^n \right|;$

- число шагов интегрирования (I_j), рассчитанных без перевычисления матрицы Якоби.

Величина шага интегрирования, а, следовательно, объем и точность вычислений, контролируются следующими параметрами:

Δ_x – максимально допустимое значение величины Δ ;

ε_N – максимально допустимое значение величины ε ;

J_h – максимально допустимое количество приближений на шаге интегрирования;

J_p – допустимое количество приближений без пересчета матрицы частных производных;

J_2 – минимально необходимое (для удвоения шага) число шагов интегрирования, выполненных без пересчета якобиана.

Итерации на шаге завершаются, если: $J_n > J_h$ или $\varepsilon < \varepsilon_N$. Матрица частных производных перевычисляется на n -ом шаге, если $J_n > J_p$. Удвоение шага интегрирования h_n происходит при совместном выполнении следующих условий: $J_n \leq J_p$; $\varepsilon < \varepsilon_N$; $J_n > J_2$; $\Delta \leq \Delta_x$. Дробление шага интегрирования происходит в случае выполнения одного из условий: $\varepsilon > 3\varepsilon_N$; или $\Delta > 3\Delta_x$. В остальных случаях шаг интегрирования h_n остается постоянным. Длительная апробация метода Пирумова на различных типах задач и наборах исходных данных [22] позволила установить следующие значения параметров: $\Delta_x = 0,005$; $\varepsilon_N = 10^{-5}$; $J_h = 12$; $J_2 = 3$;

$J_p = 7$.

В программном комплексе NERCHIM для проверки численной точности используются соотношения сохранения атомов, которые не применяются при интегрировании уравнений химической кинетики. Для каждого типа атомов показатель отклонения от сохранения атомов определяется по формуле:

$$\delta r_k = \frac{\left| \left(\sum a_{ki} r_i^d + r_k^d \right) - \left(\sum a_{ki} r_i^e + r_k^e \right) \right|}{\left(\sum a_{ki} r_i^e + r_k^e \right)} \quad i = 1, \dots, n_b \ (k \neq i); \quad k = 1, \dots, n_a; \quad (28)$$

где: индексы e и d означают химически-равновесное и неравновесное значения, соответственно; n_a – число типов атомов в реагирующей смеси.

Используется также показатель средней ошибки по атомам: $\delta r_m = \left(\sum \delta r_k \right) / n_a$. В качестве примера в Таблице 1 представлены результаты расчетов по влиянию параметров ε_N и Δ_x на среднюю ошибку по атомам для реагирующей среды (С-Н-О-Н), включающей 30 веществ и 121 реакцию. Расчеты выполнены для условия адиабатического реактора при $P = 1$ атм, $T_0 = 1400$ К, $\tau_f = 10^{-3}$ с, $\alpha_{ox} = 1$; окислитель: обогащенный воздух (60% O_2 + 40% N_2); горючее C_2H_2 (10%) + CH_4 (80%) + NH_3 (10%).

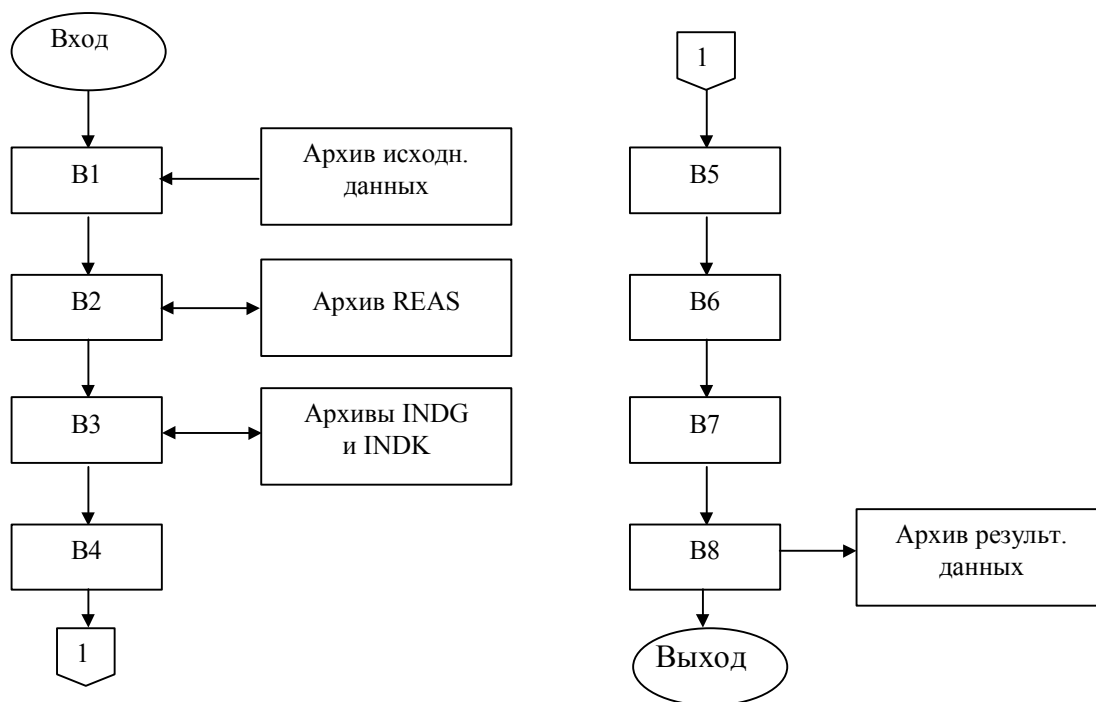
Таблица 1. Влияние параметров ε_N и Δ_x на ошибку δr_m .

Влияние ε_N (при $\Delta_x = 0,005$)							
Параметр ε_N	10^{-7}	$5 \cdot 10^{-7}$	10^{-6}	$5 \cdot 10^{-6}$	10^{-5}	$5 \cdot 10^{-5}$	10^{-4}
$\delta r_m(\theta) \cdot 10^4$	9,47	9,95	9,92	9,68	9,87	9,87	9,87
Влияние Δ_x (при $\varepsilon_N = 10^{-5}$)							
Параметр Δ_x	0,001	0,003	0,005	0,01	0,02	0,04	0,08
$\delta r_m(\theta) \cdot 10^4$	1,54	5,82	9,87	16,9	17,4	17,4	17,4

1.7. Краткое описание базовой программы

Базовая программа – программа расчета процессов горения в адиабатном реакторе (при $P, h = \text{const}$) является самой простой из созданных программ. Однако она включает все компоненты ядра моделирования, представленные в пунктах 1.1 – 1.6 и описывает эволюцию

реагирующей смеси, в соответствии с уравнениями (7, 20). Программа написана на языке Fortran-90 и имеет дружественный интерфейс при работе с пользователем, динамическое описание массивов, является инвариантной, может прогнозировать малые мольные доли (10^{-30}), учитывает конденсированную фазу в продуктах сгорания. Кроме того, константы скорости обратных реакций определяются автоматически по константам скорости прямых реакций и константам равновесия [14].



Фигура 2. Принципиальная блок-схема базовой программы

Принципиальная схема программы показана на Фиг.2, где:

- блок В1 считывает информацию из исходного файла, который содержит: КС (код реагирующей среды), P , T_0 , r_{i0} , τ_f , h_0 (начальный шаг интегрирования) и параметры контроля расчета;
- блок В2 считывает по коду КС информацию о заданной реагирующей среде из файла REAS, структура которого показана в Таблице 2.

Таблица 2. Пример из файла реагирующих сред REAS:

O2+H2				!Код реагирующей среды
Н, H2, O, O2, H2O1, O1H1, H1O2;				!Набор веществ
O2+H2O1=H1O2+O1H1	14.8	0	73060	!Формула реакции, lgA^+, n^+, E^+
O2+H2=2O1H1	12.403	0	39000	—//—
H2 + O1H1 = H2O1 + H	13.382	0	5200	—//—
H+O2=O1H1+O	14.3	0	16700	—//—
2O1H1=H2O1+O	13.159	0	0	—//—
2O+M=O2+M	15.258	0	0	—//—
H+M+O1H1=H2O1+M	16.559	0	0	—//—
O+H+M=O1H1+M	16.1615	0	0	—//—
H2+H+O2=H2O1+O1H1	18.0	0	0	!Формула реакции, lgA^+, n^+, E^+

Эта таблица содержит строку кода КС, строки набора веществ (B_i, B_i^*) в данной реагирующей среде и механизм химических реакций, который включает для каждой реакции ее символьную запись и коэффициенты A_j^+, n_j^+, E_j^+ аррениусовой зависимости для констант скорости прямых реакций;

- блок В3 считывает из файлов INDG и INDK по символам веществ B_i, B_i^* информацию о коэффициентах теплофизических и термодинамических свойств веществ: $\mu, \sigma, \varepsilon/\kappa, A_S, A_I, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6, a_7, z_v, T_{min}, T_{max}$. Фрагменты этих файлов представлены в Таблицах 3 и 4.

Таблица 3. Пример из файла газообразных веществ INDG:

Н					!Символ вещества
0.100799E1	0.212000E1	0.505399E3	0.334136E2	0.506386E5	! $\mu, \sigma, \varepsilon/\kappa, A_S, A_I$
0.497335E4	-0.705295E1	0.464247E1	-0.162988E1	0.312332E0	! a_1, a_2, a_3, a_4, a_5
-0.507867E1	0.121980E2	0.100000E1	300.0	5000.0	! $a_6, a_7, v_a, T_{min}, T_{max}$

Таблица 4. Пример из файла конденсированных веществ INDK:

AL2O3*	101,96		! Символ вещества, μ
900.	2326.	6000.	! T_1, T_2, T_3
0.765385E01	0.396356E02	0.486349E02	! A_{S1}, A_{S2}, A_{S3}
-0.404692E06	-0.409829E06	-0.402946E06	! $A_{I1}, A_{I2}, A_{I3},$
0.748686E04	0.262364E05	0.389306E05	! a_{11}, a_{12}, a_{13}
0.249092E05	0.168176E04	-0.133173E00	! a_{21}, a_{22}, a_{23}
-0.966457E04	0.549886E02	0.997356E02	! a_{31}, a_{32}, a_{33}
0.554300E04	0.554300E04	0.554300E04	! b_{01}, b_{02}, b_{03}
-0.108000E04	-0.108000E04	-0.108000E04	! b_{11}, b_{12}, b_{13}

где b_{01}, \dots, b_{13} – коэффициенты аппроксимации плотности конденсата.

Для расчета H_i, S_i^0 используются формулы из [16]:

а) для газообразных веществ:

$$H = A_I + \sum_{q=1}^7 a_q x^q \quad x = 0,001 \cdot T; \quad T=300...5000\text{K}. \quad (29)$$

$$S^0 = A_S + 10^{-3} a_1 \ln x + \sum_{q=2}^7 \frac{q}{q-1} a_q x^{q-1} \quad (30)$$

б) для конденсированных веществ:

$$H = a_I + \sum_{q=1}^3 a_q x^q; \quad x = 0,001 \cdot T; \quad (31)$$

$$S^0 = a_S + 10^{-3} a_1 \ln x + \sum_{q=2}^3 \frac{q}{q-1} a_q x^{q-1}; \quad (32)$$

- блок В4 выполняет лингвистический анализ символьной информации, присваивание номеров реакциям и веществам, проверку на отсутствие ошибок в записи реакций и формирует вспомогательные матрицы для расчета химического равновесия ($P, h = \text{const}$) и т.д.;

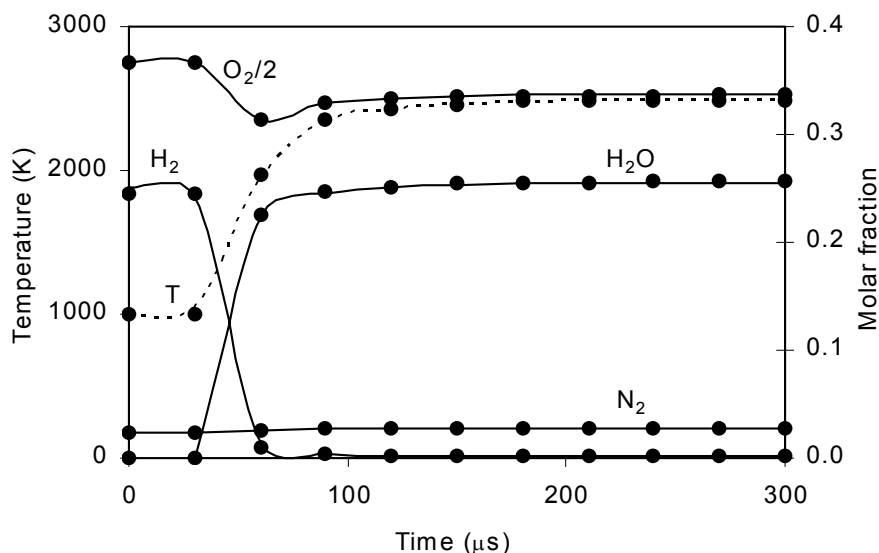
- блок В5 реализует расчет химического равновесия при $P, h = \text{const}$;
- блок В6 выполняет предварительные вычисления для химически неравновесного расчета: определяет “опорные” параметры H_i^{rf}, C_i^{rf} ; константы скоростей обратных реакций k_j^- и формирует координирующие матрицы для расчета правых частей уравнений химической кинетики;
- блок В7 реализует химически-неравновесный расчет изменения состава реагирующей смеси в условиях адиабатного реактора по уравнениям (7, 20) методом Пирумова (п.1.6);
- блок В8 выполняет заключительные расчеты, определяет показатели погрешности и записывает результаты расчета в выходной файл.

Структура входного и выходного файлов ассоциирована только с программой ADIABAT, в то время как файлы REAS, INDG, INDK являются общими для всех программ пакета NERCHIM и образуют основную базу данных этого пакета. Отметим, что существует ряд аналогичных баз данных о веществах и реакциях, например: LEED'S [23], BURCAT [19], TERMO [17], IVTANTERMO [24], в которых форма аппроксимации термодинамических свойств веществ отличается от формы (29, 30). Например, в базе IVTANTERMO энтальпия и энтропия газообразных веществ представляются зависимостями:

$$H = \Delta H_f^o + 10^4 [-2a_{-2}x^{-1} - a_{-1} + a_Lx + a_1x^2 + 2a_2x^3 + 3a_3x^4] \quad (33)$$

$$S^o = -a_{-2}x^{-2} + a_L \ln x + a_0 + a_L + 2a_1x + 3a_2x^2 + 4a_3x^3 \quad x = 0,0001 \cdot T \quad (34)$$

на одном или нескольких температурных интервалах (a_2, \dots, a_3 – коэффициенты аппроксимации). Однако, благодаря созданию программы переаппроксимации APPR можно легко расширить базу данных NERCHIM данными о веществах из других баз.

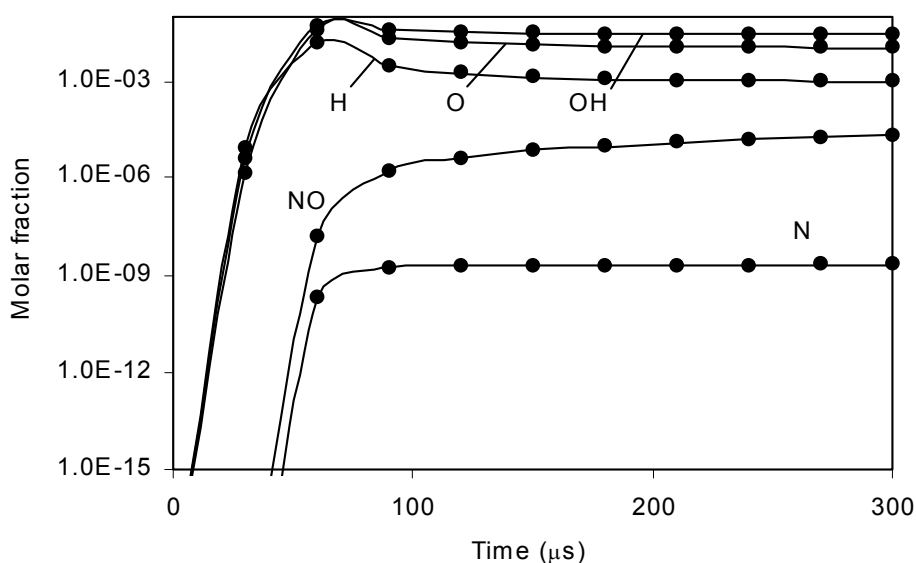


Фигура 3. Изменение во времени веществ H_2, O_2, H_2O, N_2 и температуры NERCHIM —, CHEMKIN •

Известный пакет CHEMKIN [7] также использует реакторный подход и базируется на похожей идее предварительного создания некоторого ядра моделирования. Этот пакет, как и NERCHIM, является инвариантным относительно реагирующей среды, но имеет значительные отличия, например:

- пакеты используют разные базы данных по веществам: NERCHIM - базу ТТИ [1], а CHEMKIN - базу TERMO [17];
- в CHEMKIN применяется традиционная форма уравнений химической кинетики, а в NERCHIM – экспоненциальная форма;
- для интегрирования уравнений в CHEMKIN используется метод Gear, а в NERCHIM – метод Пирумова.

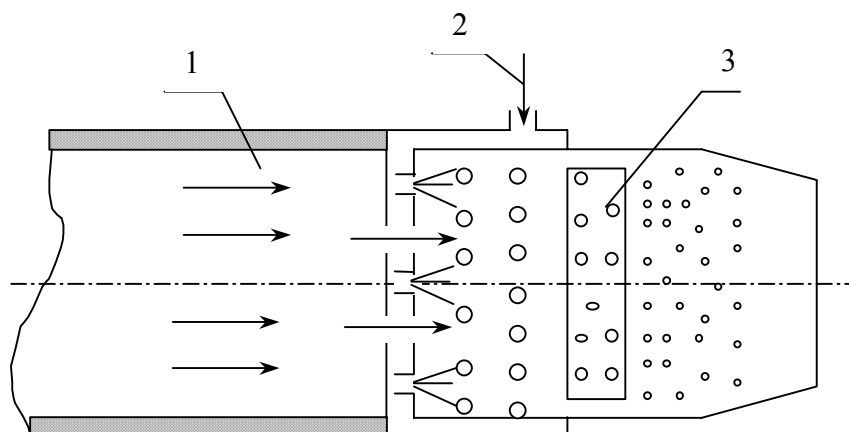
Поэтому является важным сравнение результатов расчетов по базовым программам этих пакетов (в CHEMKIN также включена программа расчета процессов для условий $P, h = \text{const}$). Сравнение проводилось для реагирующей среды, включающей вещества H, O, N, H₂, O₂, OH, HO₂, HO, H₂O, N₂, NO и 23 реакций при $P = 1 \text{ атм}$, $T_0 = 1000 \text{ К}$ и начальном составе: $r_{\text{H}_2} = 0,244$, $r_{\text{O}_2} = 0,732$ и $r_{\text{N}_2} = 0,024$. На Фиг. 3 и 4 представлены изменения во времени температуры и состава реагирующей смеси и, как видно, результаты расчетов очень близки друг к другу, несмотря на вышеупомянутые отличия.



Фигура 4. Изменение во времени веществ NO, H, O, OH, N
NERCHIM —, CHEMKIN ●

2. Моделирование газожидкостных реагирующих течений

Газожидкостные реагирующие течения представляются одной из наиболее сложных и актуальных областей приложения для математического моделирования высокотемпературных процессов. Такие течения составляют основу процессов в камерах сгорания энергоустановок, газогенераторах, парогазогенераторах, форсажных устройствах, топках. На Фиг.5 представлена принципиальная схема реагирующего газожидкостного течения. Имеется канал, в который втекает газовый поток. В некотором сечении через систему форсунок в поток впрыскивается жидкий компонент. В результате аэродинамического взаимодействия эта жидкость диспергируется на мелкие капли различного диаметра (5...200μк), которые уносятся потоком. Между каплями и газом формируется пограничный слой. Через этот слой происходит тепло- и массообмен между газом и каплями. Если разница между скоростями $|V_m - V_s|$ мала, вокруг капли формируется фронт пламени, а если она значительна, горение происходит в газовой среде. Испарившийся компонент изменяет свойства газовой среды, ее скорость, температуру и состав.



Фигура 5. Принципиальная схема реагирующего газожидкостного течения: 1 – газообразный окислитель; 2 – жидкий компонент; 3 – движущийся реактор

Опубликовано множество работ теоретического характера, посвященных газожидкостным реагирующим течениям. Однако до настоящего времени практически отсутствуют комплексные математические модели, учитывающие явления в их взаимосвязи и реализованные в инвариантной программе. В этой секции излагается одна из таких комплексных моделей, в которой для моделирования стационарных газожидкостных течений было предложено применить физическую схему движущегося реактора с соответствующими базовыми компонентами, представленными в п.1.

2.1 Физическая схема процессов

Схема газо-жидкостных течений, созданная на основе работ [25, 15, 26, 27, 28], учитывает следующие явления: полидисперсность спектра распыла капель, различные скорости капель жидкости и газа, конечность скоростей протекания химических реакций в газовой фазе, переменность геометрии канала, нестационарный и неравномерный прогрев капли по радиусу, газификацию однородной капли жидкости при до- и сверхкритических давлениях (для $P < P_{кр}$ и для $P > P_{кр}$), реальные свойства паров испаряющейся жидкости, возможность образования конденсированных веществ в продуктах сгорания.

В модели также приняты следующие допущения:

- течение газожидкостной смеси является одномерным;
- начальный состав газовой фазы является известным;
- капли жидкости распределяются равномерно по сечению канала;
- справедливо уравнение состояния идеального газа;
- капли имеют сферическую форму;
- пограничный слой вокруг капли имитируется приведенной пленкой;
- в приведенной пленке химические реакции не протекают;
- предполагается параболическое распределение температуры по радиусу капли.

В ходе разработки комплексной модели реагирующих газожидкостных течений авторами была создана собственная физическая схема испарения капель при $P > P_{кр}$, принципиально согласующаяся с физическими схемами, предложенными впоследствии в работах [29, 30].

2.2 Математическая модель

Математическая модель включает:

- уравнения химической кинетики, приведенные от времени τ к линейной координате:

$$\frac{d\gamma_i}{dx} = -\frac{1}{V_m} \left(e^{\gamma_i} \sum_j \nu_{ij} \Omega_j + \sum_q \sum_j \nu_{qj} \Omega_j \right); \quad i, p, q = 1 \dots n_b; \quad j = 1 \dots (2m_b + r_b); \quad (35)$$

где: $\Omega_j = k_j (P / R_0 T)^{\bar{m}_j} \exp\left(-\sum_p n_{pj} \gamma_p\right)$; $\bar{m}_j = m_j - 1 + \sum_p n_{pj}$; $\gamma_i = -\ln r_i$;

- калорическое уравнение (20);

и уравнения сопутствующих процессов: движения капель, нагрева и испарения капель, изменения теплосодержания ($\Phi_s = m_s h_s$) капель, теплосодержания капель, изменения температуры центра капли (a_s), первого этапа испарения, второго этапа испарения, движения для всего течения, энергии для всего течения, краткий вывод которых представлен ниже.

Исходная форма уравнения движения для капель [25] имеет вид:

$$\frac{dV_s}{d\tau} = \frac{1}{m_s} C_{xs} \rho_m \frac{\pi R_s^2 \cdot (V_m - V_s) \cdot |V_m - V_s|}{2}; \quad s = 1, \dots, k_p \quad (36)$$

Используя понятие относительного расхода s -ой группы:

$$\bar{G}_s = \frac{m_s F_s}{G_\Sigma}; \quad (37)$$

где: $G_\Sigma = \sum_s G_s + G_m$; ($F_s = \text{const}$ по длине канала).

Тогда, применяя уравнение состояния идеального газа, формулу $R_s = (3m_s / 4\pi\rho_s)^{1/3}$ и переходя от времени τ к линейной координате x вдоль канала, после несложных преобразований получим окончательную форму уравнения движения капель:

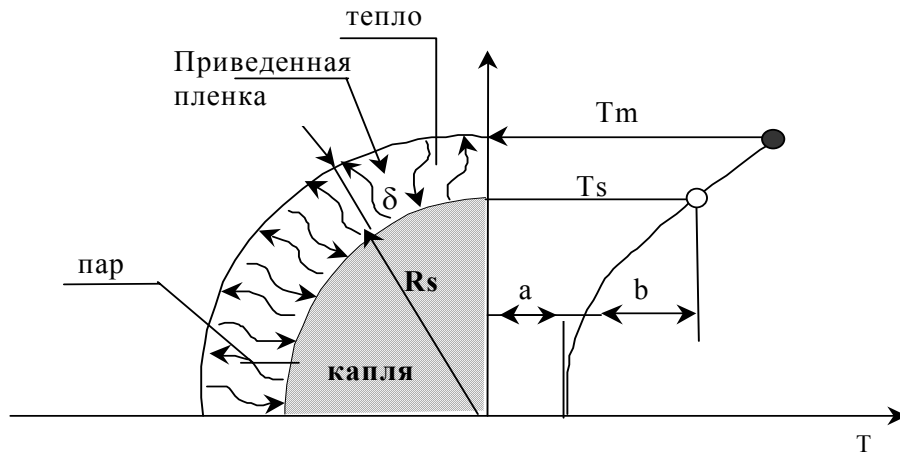
$$\frac{dV_s}{dx} = K_s^c \frac{P \mu_m}{V_s T_m} \cdot \frac{(V_m - V_s) |V_m - V_s|}{(\bar{G}_s)^{0,33}} \equiv f_v^s; \quad (38)$$

где: $K_s^c = \pi \frac{C_{xs}}{R_o} \left(\frac{3}{4\pi\rho_s}\right)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{F_s}{G_\Sigma}\right)^{\frac{1}{3}}$.

Одним из определяющих процессов, существенно влияющих на характер и параметры газожидкостных течений, является испарение капли в потоке высокотемпературной газовой смеси. Модель расчета реагирующих газожидкостных течений рассматривает схему испарения капли, как процесс, идущий в два этапа. На первом этапе капля нагревается в соответствии с обычными соотношениями нестационарного прогрева от температуры T_0 до некоторой температуры T_{np} (близкой к T_{kp}) на поверхности. Температура T_{np} определяется из условия равенства сил межмолекулярного сцепления жидкости аэродинамическим силам воздействия на каплю [31].

На втором этапе температура поверхности остается практически постоянной, но внутренняя область капли продолжает прогреваться. Скорость газификации увеличивается до уровня, обеспечивающего компенсацию тепловых потоков к капле. Граница поверхности капли при этом перемещается по мере достижения внутренними слоями температуры T_{np} . Увеличение скорости диффузии пара через приведенную пленку можно объяснить началом образования вторичных микрокапель, которые отрываются от поверхности основной капли и затем испаряется. Этот эффект обуславливается действием аэродинамических сил, разрушающих поверхностный слой, ввиду существенного уменьшения сил поверхностного натяжения при $T_s(R_s) \rightarrow T_{кр}$. Принципиальным моментом этой физической схемы является неравномерность распределения температуры по радиусу капли, хотя сам характер распределения $T_s(r)$ не столь важен. Поэтому с целью упрощения модели испарения было выбрано параболическое распределение температуры (Фиг. 6):

$$T_s = a_s + b_s (r / R_s)^2 ; \quad (39)$$



Фигура 6. Схема испарения капли жидкости.

Начальная форма уравнения испарения была принята в соответствии с [15]:

$$\frac{dm_s}{d\tau} = -4\pi R_s^2 \frac{D_v P \mu_v}{R_o T_m \gamma \delta_v^*} \ln \left(1 - \gamma \frac{P_{vs}}{P} \right); \quad (40)$$

где: $\gamma = (1 - \rho_v / \rho_s)$.

Раскрывая величины δ_v^* и D_v по [15, 16] и выполняя замену переменных:

$$z_s^2 = - \ln \left(1 - \gamma \frac{P_{vs}}{P} \right); \quad (41)$$

и переходя от τ к x получим уравнение испарения капли:

$$\frac{d\bar{G}_s}{dx} = \left(\frac{\bar{G}_s}{\rho_s} \right)^{1/3} \frac{(T_m + T_s^R)^{3/2} z_s^2 K_G^s}{T_m V_s} \equiv f_G^s ; \quad (42)$$

где: $K_G^s = 0,07243 \left(\frac{H_s}{G_\Sigma} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{\sqrt{(\mu_v + \mu_m)/(2\mu_v \mu_m)} Nu_D \mu_v}{\sigma_{vm}^2 \cdot \Omega_{1,1}^* R_o}$; $\Omega_{1,1}^* = f(\varepsilon/\kappa, T)$ -интеграл столкновений;

Nu_D - Нуссельт диффузионный.

При выводе уравнений нагрева капли использовался метод Прима Хейдмана [26], но с учетом зависимости (39) по радиусу капли. Для этого в начальной форме уравнения нагрева капли используем понятие ее теплосодержания ($\Phi_s = m_s h_s$) вместо температуры:

$$\frac{d\Phi_s}{d\tau} = Q_s + (L_v + h_{sR}) \frac{dm_s}{d\tau}; \quad (43)$$

где: h_{sR} - энтальпия жидкости на поверхности капли; Q_s – тепловой поток, переданный в каплю.

Тогда проводя преобразования, аналогичные [26] получим:

$$\frac{d\Phi_s}{d\tau} = \frac{dm_s}{d\tau} \left(L_v + h_{sR} - \frac{c_{ps}^{vm} (T_m - T_s^R)}{\exp(K_e^s z_s^2) - 1} \right); \quad (44)$$

где: $K_e^s = \frac{D_v P \mu_m c_{ps}^{vm}}{\lambda_{vm} R_o T_m \cdot \left(1 - \frac{\rho_v^R}{\rho_s^R} \right)}$.

Заменяя переменную Φ_s на $\bar{\Phi}_s = \Phi_s / \Phi_{so}$, учитывая формулы (37), (42) и переходя к линейной координате x получим уравнение изменения теплосодержания капли:

$$\frac{d\bar{\Phi}_s}{dx} = f_G^s \cdot K_\Phi^s \left(L_v + h_{sR} - \frac{\bar{c}_{ps}^{vm} \cdot (T_m - T_s^R)}{\exp(z_s^2 \cdot K_e^s) - 1} \right) \equiv f_\Phi^s; \quad (45)$$

где: $K_\Phi^s = G_\Sigma / (\Phi_o F_s)$.

В систему уравнений нагрева капли также необходимо включить соотношение для зависимости теплосодержания Φ_s от a_s , b_s и m_s . С целью его упрощения предварительно была сформирована таблица $h_s = f(a_s, b_s)$ для различных a_s и b_s , которая затем была аппроксимирована как функция двух переменных:

$$h_s = A + B \cdot a_s + C \cdot b_s + D \cdot a_s \cdot b_s + E \cdot a_s^2 + F \cdot b_s^2; \quad (46)$$

где: A, B, C, D, E, F – коэффициенты аппроксимации.

Тогда после простых преобразований уравнение теплосодержания примет вид:

$$\bar{\Phi}_s - \bar{G}_s K_\Phi^s (A + B \cdot a_s + C \cdot b_s + D \cdot a_s \cdot b_s + E \cdot a_s^2 + F \cdot b_s^2) = 0; \quad (47)$$

Подставляя зависимость (39) в известное уравнение теплопроводности для сферы:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\bar{\lambda}_s}{\bar{c}_s \bar{\rho}_s} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right); \quad (48)$$

где: $\bar{\lambda}_s, \bar{c}_s, \bar{\rho}_s$ - средние теплопроводность, теплоемкость и плотность s-ой группы капель. можно формально получить соотношение для изменения температуры центра капли в виде:

$$\frac{da_s}{dx} = \frac{b_s K_a^s}{V_s \rho_s^{1/3} \cdot \bar{G}_s^{2/3}} \equiv f_a^s; \quad (49)$$

$$\text{где: } K_a^s = 6\bar{\lambda}_s \left/ \left(\bar{c}_s \left(\frac{G_\Sigma}{F_s} \frac{3}{4\pi} \right)^{2/3} \right) \right.$$

Для каждого этапа испарения необходимо сформировать уравнение, которое связывает фактор испарения (z_s) с температурой на поверхности частицы T_s^R . Для первого этапа аппроксимируя давление насыщенных паров полиномом 3-ей степени:

$$P_{vs} = \sum_0^3 \beta_i (T_s^R)^i = \sum_0^3 \beta_i (a_s + b_s)^i; \quad (50)$$

из формулы (41) получим:

$$z_s^2 - \ln \left(1 - \gamma_s \sum_{i=0}^3 \beta_i (a_s + b_s)^i / P \right) = 0; \quad (51)$$

где: β_i - коэффициенты аппроксимирующего полинома.

На втором этапе испарения температура поверхности s-ой капли остается неизменной. Поэтому имеем:

$$T_s^R = a_s + b_s = const; \quad \text{т.е.} \quad \frac{da_s}{dx} = - \frac{db_s}{dx}; \quad (52)$$

Тогда логарифмируя и дифференцируя соотношение (47) и учитывая (37, 42, 45-47, 49, 52) после ряда преобразований можно получить уравнение для фактора испарения z на этом этапе:

$$\frac{1}{\Phi_s} \cdot f_\Phi^s - \frac{1}{G_s} f_G^s - \frac{1}{h_s} f_a^s [(B - C) + a_s (2E - D) + b_s (D - 2F)] = 0; \quad (53)$$

где переменная z_s входит в функции f_Φ^s, f_G^s .

Для вывода уравнения движения всего течения используем соотношение:

$$d \left(G_m V_m + \sum_s F_s m_s V_s \right) = AdP; \quad (54)$$

где: A – площадь канала.

Дифференцируя его по x получим:

$$G_m \frac{dV_m}{dx} = A \frac{dP}{dx} - V_m \frac{dG_m}{dx} - \sum_s V_s \frac{d(m_s F_s)}{dx} - \sum_s m_s F_s \frac{dV_s}{dx}; \quad (55)$$

Расход газовой фазы, используя формулу (37), запишется в виде:

$$G_m = G_\Sigma \left(1 - \sum_s \bar{G}_s \right); \quad (56)$$

Тогда получим:

$$G_\Sigma \left(1 - \sum_s \bar{G}_s \right) \frac{dV_m}{dx} = A \frac{dP}{dx} - G_\Sigma \sum_s (V_s - V_m) \frac{d\bar{G}_s}{dx} - G_\Sigma \sum_s \bar{G}_s \frac{dV_s}{dx}; \quad (57)$$

Используя уравнение непрерывности для газовой фазы:

$$\rho_m V_m \left(A - \sum_s A_s \right) = G_\Sigma \left(1 - \sum_s \bar{G}_s \right); \quad (58)$$

и соотношение:

$$\sum_s A_s = G_\Sigma \sum_s \frac{\bar{G}_s}{V_s \rho_s}; \quad (59)$$

(где $\sum_s A_s$ - площадь, занимаемая каплями жидкости) получаем формулу для площади, занимаемой всем течением:

$$A = \frac{G_\Sigma \left(1 + \frac{P \mu_m V_m}{R_o T_m} \sum_s \frac{\bar{G}_s}{V_s \rho_s} - \sum_s \bar{G}_s \right)}{P \mu_m V_m / R_o T_m}; \quad (60)$$

Подставляя (59) в (57) и учитывая формулы (38) и (42) можно получить уравнение для скорости газа:

$$\frac{dV_m}{dx} = - \left[\frac{1 - \rho_m V_m \sum_s \bar{G}_s / (V_s \rho_s) - \sum_s \bar{G}_s}{\rho_m V_m} \cdot \frac{dP}{dx} + \sum_s (V_s - V_m) f_G^s + \sum_s \bar{G}_s \cdot f_v^s \right] \frac{1}{1 - \sum_s \bar{G}_s} \equiv f_v^m; \quad (61)$$

Начальную форму уравнения энергии для всего течения запишем в виде:

$$G_m h_m^* + \sum_s F_s m_s h_s^* = G_\Sigma h_\Sigma = const; \quad (62)$$

Используя соотношения:

$$h_m^* = h_m + \frac{V_m^2}{2}; \quad h_s^* = h_s + \frac{V_s^2}{2}; \quad (63)$$

получим уравнение энергии в окончательном виде:

$$h_m + \frac{V_m^2}{2} - \frac{h_s - \sum_s \bar{G}_s \left(h_s + \frac{V_s^2}{2} \right)}{1 - \sum_s \bar{G}_s} = 0; \quad (64)$$

В итоге модель реагирующего газожидкостного течения представляется системой из $(n_b + 6k_p + 3)$ уравнений (20, 35, 38, 42, 45, 47, 49 или 51, 53, 61, 64) с неизвестными: $\gamma_i, \bar{G}_s, V_s, \bar{\Phi}_s, a_s, b_s, z_s, V_m, h_m, T_m$.

Константы скорости реакции массообмена ($\rightarrow Q_v$) имеет нулевой порядок и равна числу грамм-молей испаренного вещества, подводимого за 1 сек в единицу реагирующего газового объема. При ее определении примем, что между 2-мя сечениями канала, находящимися на расстоянии Δx друг от друга, в течение времени $\Delta \tau$ подводится

$G_\Sigma \left(\sum_s \frac{d\bar{G}_s}{dx} \right) \frac{dx d\tau}{\mu_v}$ грамм-молей пара, который входит в объем газа:

$$A_m dx = \frac{G_m dx}{\rho_m V_m}; \quad (65)$$

Тогда константа скорости будет определяться по формуле:

$$k_v = \frac{G_\Sigma \frac{dx \Delta \tau}{\mu_v} \sum_s \frac{d\bar{G}_s}{dx}}{\frac{G_m dx \Delta \tau}{\rho_m V_m}} = \frac{\rho_m V_m \sum_s \frac{d\bar{G}_s}{dx}}{\mu_v \left(1 - \sum_s \bar{G}_s \right)}; \quad (66)$$

и учитывая, что обычно в константах химических реакций используются единицы *гмоль, см, с*, это выражение примет окончательный вид:

$$k_v = \frac{0,001 P \mu_m V_m \sum_s \frac{d\bar{G}_s}{dx}}{R_o T_m \mu_v \left(1 - \sum_s \bar{G}_s \right)}; \quad (67)$$

Параметры приведенной пленки, используемые в уравнениях испарения и нагрева капли, определяются по формуле:

$$x_{vm} = \left(1 - \frac{P_{vs}}{2P}\right)x_m + \frac{P_{vs}}{2P}x_v; \quad (68)$$

где: $x \in \rho, c_p, \lambda, \eta$ (η - вязкость).

Числа Nu_t (Нуссельт тепловой), Nu_D (Нуссельт диффузионный) определяются по формулам, представленным в [15]. Данные о свойствах жидкости были заимствованы из справочника [32] и затем аппроксимированы полиномами третьей степени. Алгоритм расчета незначительно отличается от описанного в п.1.6 и подробно излагается в [31]. Программный комплекс для расчета газожидкостных течений является инвариантным относительно газовой среды и состава испаряющейся жидкости, которая должна быть монокомпонентной.

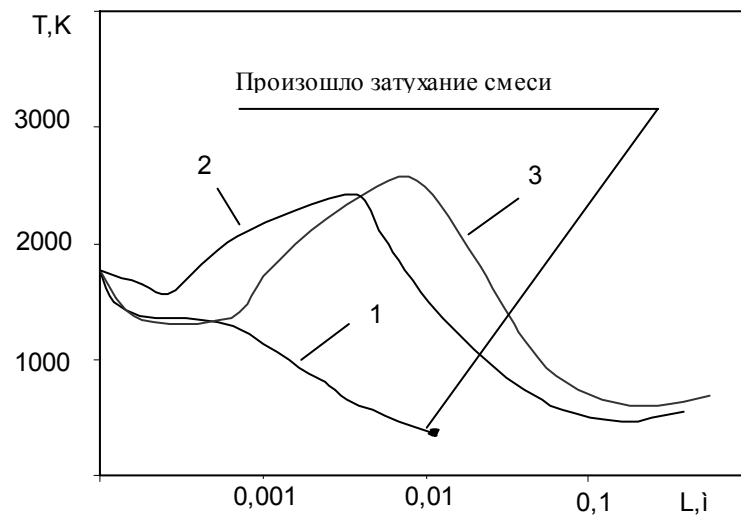
2.3 Примеры расчетов

В качестве примеров были выбраны два типа реагирующих течений: “ $N_2O_4 + C_2H_8N_2$ ” при $\alpha_{ок} \gg 1$ и “ $O_2 + CH_4$ ” при $\alpha_{ок} \ll 1$.

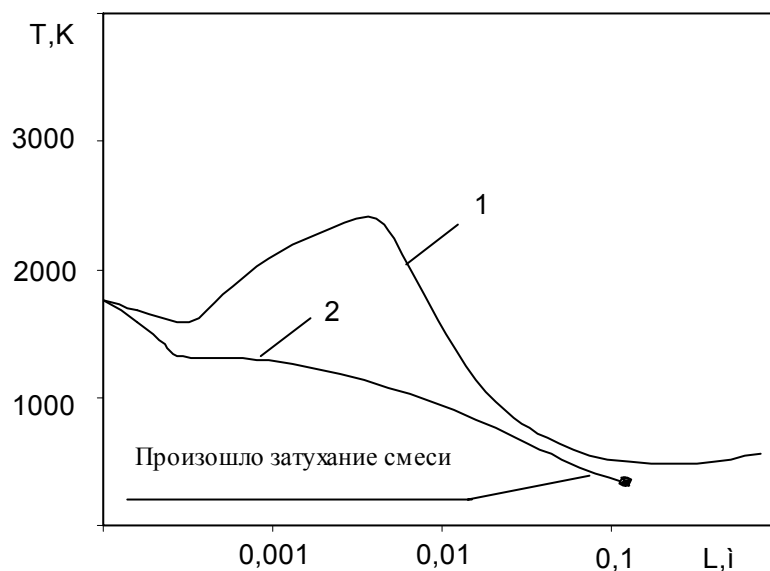
Реагирующая среда $(N_2O_4 + C_2H_8N_2)_m + (N_2O_4)_s$. Здесь принимается, что на входе в канал подается равновесная рабочая смесь продуктов сгорания азотного тетроксиды и несимметричного диметилгидразина с избытком горючего ($\alpha_{ок}^0 = 0,3$), а в газовую смесь подводится балластирующий жидкий компонент N_2O_4 в количестве, необходимом для достижения коэффициента избытка окислителя $\alpha_{ок}^f = 7,0$. Принимались следующие параметры рабочего тела в сечении подвода: $V_m^0 = V_s^0 = 10 \text{ м/с}$, $P = 10 \text{ МПа}$, $T_0 = 1752 \text{ К}$, $G_m = 1,9 \text{ кг/с}$, $\sum G_s = 20,1 \text{ кг/с}$. Реагирующая система включала вещества: O, C, H, N, O_2 , H_2 , OH, H_2O , N_2 , NO, NO_2 , NH, NH_2 , NH_3 , CO, CO_2 , CH_3 , CH_4 , между которыми протекали 35 реакций [33]. Очевидно, что при таком высоком расходе балластирующего компонента и относительно низкой температуре газа, возникает опасность прекращения процесса горения. Для предотвращения этого явления необходимо подобрать соответствующий начальный спектр распыла и относительный расход по каждой группе капель.

Предварительные численные исследования показали, что при монодисперсном спектре распыла капля прекращения горения происходит независимо от диаметра капель и скоростей V_m и V_s . Следовательно, для реализации горения необходимо организовать распыл балластирующего компонента таким образом, чтобы добиться быстрого испарения первой группы капель (например, для повышения $\alpha_{ок}$ от 0,3 до 1,0) еще до того, как начнется интенсивное испарение других групп. Для проверки этой возможности допустим, что распыливаемая жидкость состоит из двух групп капель с расходами G_1 и G_2 . Допустим также, что относительный расход первой группы капель $\bar{m}_1 = G_1 / (G_1 + G_2) = 0,1$, а второй группы $\bar{m}_2 = 0,9$. Капли первой группы имеют малый диаметр ($d_1 = 5 \div 30 \text{ мкм}$), а диаметр капель второй группы значительно выше ($d_2 = 200 \div 500 \text{ мкм}$). Это позволяет задержать процесс интенсивного испарения основной массы балластирующего компонента (что является определяющим фактором снижения T_m) до того момента, когда капли первой группы полностью испарятся и, прореагировав с горючим, обеспечат значительное повышение температуры газовой смеси до высоких значений (Фиг. 7, 8). Далее T_m снижается из-за испарения и переобогащения газовой смеси балластирующим компонентом. В результате ряда расчетов было установлено, что наиболее выгодными с конструктивной точки зрения являются следующие интервалы диаметров капель: $d_1 = 20 \div 30 \text{ мкм}$, $d_2 = 150 \div 200 \text{ мкм}$ (см. Фиг.7). В этом случае затухания не происходит и в то же время существенно уменьшается расстояние, на котором балластирующий компонент полностью испаряется.

При $d_2 \leq 100\mu\text{м}$ интенсивное испарение второй группы каплей наступает гораздо раньше, что приводит к прекращению горения. Кроме того, из Фиг. 8 видно, что большая разность скоростей газа и жидкости также является причиной затухания, так как она инициирует интенсивное испарение и, как следствие, значительное снижение температуры газа ($T_m \leq 1000\text{К}$). Расчеты также показали, что в этих условиях существенными являются эффекты химической неравновесности, причем максимальное отличие от равновесных концентраций наблюдается у компонентов CO и NO, определяющих эмиссионные характеристики газогенератора.



Фигура 7. Влияние спектра распыла каплей на устойчивость горения: $\alpha_{ok}^0 = 0,3$; $\alpha_{ok}^f = 7,0$; $V_m = V_s = 10\text{м/с}$; 1- $d_1=25\mu\text{м}$; $d_2=75\mu\text{м}$; 2 - $d_1=25\mu\text{м}$; $d_2= 200\mu\text{м}$; 3 - $d_1=7\mu\text{м}$; $d_2=300\mu\text{м}$



Фигура 8. Влияние относительных скоростей газа и жидкости на устойчивость горения: $\alpha_{ok}^0=0,3$; $\alpha_{ok}^f=7,0$; $d_1=25\mu\text{м}$; $d_2=200\mu\text{м}$; 1- $V_m = V_s = 10\text{м/с}$; 2 - $V_m = 100\text{м/с}$; $V_m = 50\text{м/с}$.

Реагирующая среда $(O_2 + CH_4)_m + (CH_4)_s$. Для этой среды оценивались возможности модели для прогнозирования образования сажи на режимах $\alpha_{ок}^f \ll 1$. Механизм реакций включал вещества: H, H₂, O, O₂, C, H₂O, CO, CO₂, OH, CH₄, HO₂, CH₂, CH₃, HCO, H₂CO, C₂H, N, N₂, NO, NO₂, C₄H, C₄H₂, C₄H₃, C₂H₆, C₂H₅, C₂H₃, C₂H₄, C₂H₂, HC₄* (где HC₄* - «большая молекула», модельный аналог сажевой частицы) и 170 реакций [34, 35]. При расчетах рассматривался следующий рабочий режим: на выходе из первой зоны рабочее тело находится в химическом равновесии при $\alpha_{ок}^0 = 0,6$; $V_m = 150$ м/с ("базовая" точка). Затем в некотором сечении (Фиг. 5) в эту смесь в зависимости от требуемого суммарного коэффициента избытка окислителя впрыскивается жидкий метан с температурой $T_s = 100$ К. Спектр распыла принимаем монодисперсным, длина второй зоны газогенератора $L = 0,15$ м (Фиг. 5). В кинетическом механизме представлены реакции образования полиацетиленов и их радикалов C₂H₂, C₂H, C₄H₂, C₄H, которые являются лимитирующими для процесса сажеобразования.

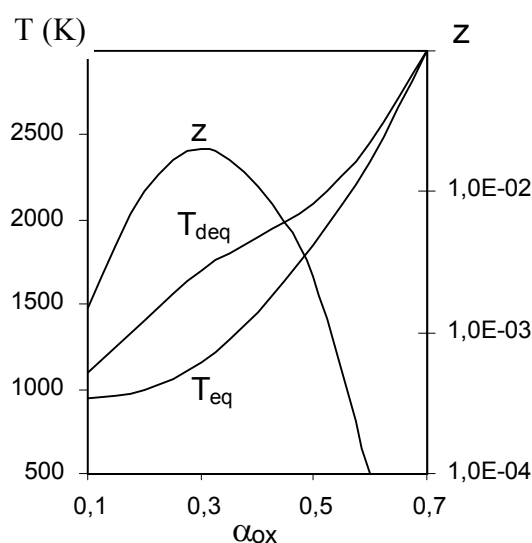
В начале было исследовано влияние суммарного коэффициента избытка окислителя ($\alpha_{ок}^f$) на степень сажеобразования. На Фиг. 9 приведена зависимость сажеобразования от этого коэффициента в диапазоне $\alpha_{ок}^f = 0,07 \div 0,6$. Концентрация сажи имеет максимум при $\alpha_{ок}^f = 0,25 \div 0,35$, который для принятых условий превышает 1,3% по массе и хорошо согласуется с рядом экспериментальных данных [36]. Этот максимум можно объяснить оптимальным сочетанием в этой точке благоприятных для сажеобразования факторов, а именно: малым количеством окислителя и высокой температурой ($T_m > 1800$ К), способствующей пиролизу метана с образованием сажевых частиц. Прослеживается также так называемый "порог" сажеобразования, выше которого выход сажи практически отсутствует. Для принятых условий он зафиксирован при коэффициенте избытка окислителя $\alpha_{ок}^f \approx 0,50$. Уменьшение сажеобразования при $\alpha_{ок}^f > 0,3$ вплоть до "порогового" значения объясняется присутствием некоторого количества окислителя и преобладанием реакций превращения полиацетиленов (предшественников сажи) не в HC₄*, а в устойчивые компоненты типа H₂O, CO, CO₂. Уменьшение концентрации HC₄* при $\alpha_{ок}^f < 0,3$ вплоть до практического отсутствия сажи при $\alpha_{ок} < 0,1$ объясняется невысокими температурами газовой смеси и стабильностью метана в этих условиях (например, при $\alpha_{ок}^f = 0,07$, $T_m = 830$ К, $g_{CH_4} = 68\%$).

Из Фиг. 9 видно, что в области максимального сажеобразования наблюдается также и максимальное превышение неравновесной температуры (T_m) продуктов сгорания над равновесной (T_m^{eq}) $\Delta T \approx 400$ К. Это вызывается образованием значительного количества продуктов неполного сгорания, существенно отличающихся от их равновесного состава (см. таблицу 5. В то же время, на режимах отсутствия сажи ($\alpha_{ок}^f < 0,1$, а также $\alpha_{ок}^f > 0,6$) эта разница не превышает 20 градусов.

Таблица 5

	r_{H_2}	r_{CO_2}	r_{H_2O}	r_{CO}	r_{CH_4}
Равновесный расчет	0.557	0.0276	0.08336	0.2927	0.0391
Неравновесный расчет	0.4477	0.021	0.18	0.274	0.0786

Таким образом подтверждается тот факт, что сажа является продуктом химической неравновесности, а прогнозирование характеристик рабочих процессов при интенсивном сажеобразовании с использованием химически равновесных моделей может привести к заметной ошибке по составу и температуре.



Фигура 9. Изменение температур T_m , T_m^{eq} и содержания сажи в продуктах сгорания на выходе из газогенератора в зависимости α_{ox}^f

3. Моделирование двухфазных реагирующих течений в соплах

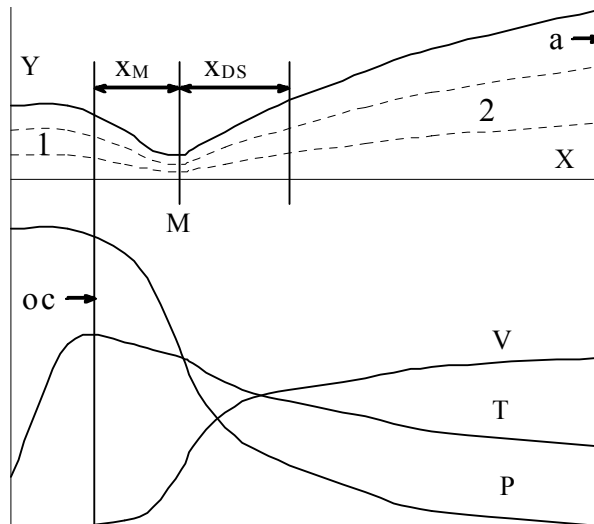
Прогнозирование характеристик высокотемпературных течений в соплах является актуальной проблемой математического моделирования процессов в жидкостных и твердотопливных ракетных двигателях. В этих соплах, как рабочее тело, используются реагирующие смеси, для которых характерны: высокие температуры ($\sim 3000\text{K}$) и давления ($\sim 100\text{атм}$); до- и сверхзвуковое течение продуктов сгорания; изменение их состава; массоперенос между фазами; взаимодействие газа с конденсированными частицами; трение и теплообмен в пограничном слое. Поэтому математическое моделирование этой картины является сложной проблемой.[37]

3.1 Общий подход при моделировании и идеальная схема течения.

В работах [16, 17] была создана идеальная модель течения в соплах, в результате чего стала возможной декомпозиция сложной картины процессов на отдельные процессы путем создания физических схем отдельных явлений, вызывающих отклонения от идеальной модели. Среди явлений, которые вызывают эти отклонения, можно указать следующие:

- двухмерность течения;
- химическая неравновесность;
- вязкость и теплопередача в пограничном слое;
- отставание частиц конденсата от газа, их дробление и коагуляция;

В двигателях, использующих химические топлива, преобразование химической энергии в тепловую происходит в камере сгорания (Фиг. 10). Невысокая скорость течения ($\sim 100\text{м/с}$) и значительное время пребывания позволяют считать, что на входе в сопло продукты сгорания находятся в химическом равновесии.



Фигура 10. Изменение характеристик рабочего тела вдоль оси сопла: 1- камера сгорания; 2- сопло; ос – входное сечение; М – минимальное; а – выходное сечение.

Это свойство допускает использование одинаковых начальных условий для отдельных физических схем и математических моделей, среди которых основными являются следующие:

- идеальная модель (модель химически-равновесного одномерного течения);
- модель химически-неравновесного одномерного течения;
- модель двухфазного одномерного течения с дроблением и коагуляцией конденсированных частиц;
- модель двумерного двухфазного течения;
- модель пограничного слоя на стенках.

Совокупность этих моделей может прогнозировать важнейшие характеристики процессов в соплах. В частности, основная характеристика – реальный удельный импульс ($I_{y\partial}$) определяется по формуле:

$$I_{y\partial} = I_{ид} (1 - \zeta_{нр} - \zeta_{\partial в} - \zeta_{нп} - \zeta_{тр} - \zeta_{кс}) \quad (69)$$

Модель идеальной схемы течения является общеизвестной [16] и базируется на следующих допущениях:

- реагирующая среда включает молекулы, радикалы и атомы, которые находятся в химическом равновесии между собой, а также с температурой и давлением в каждом сечении сопла;
- конденсированная фаза и газ имеют одинаковые скорости и температуры;
- течение в сопле является одномерным, без трения и передачи тепла на стенки.

По идеальной модели определяются:

- параметры на входе: $T_{ос}, \mu_{ос}, r_i^{ос}, z_{ос}$ и др.;
- в минимальном сечении: $P_M, T_M, \mu_M, r_i^M, I_M, V_g^M, z_M$ и др.;
- в промежуточных сечениях и на выходе из сопла: $I_{ид}, P_a, T_a, V_g^a, r_i^a, \mu_a, z_a, n_f$ и др.

3.2. Модель химически-неравновесного течения

В соответствии с принятой методикой разделения процессов, в модели химически-неравновесного течения считается, что течение является одномерным, без трения, газ и конденсированная фаза имеют одинаковые скорости и температуры, продукты сгорания подчиняются уравнению состояния идеального газа, химические реакции протекают в соответствии с законами формальной химической кинетики. Основой модели являются уравнения изменения состава в экспоненциальной форме (35).

Традиционно для математического моделирования течения в соплах существуют два типа задач [37]: прямая (если известна зависимость $A = A(x)$) и обратная (если известна зависимость $P = P(x)$) по длине сопла. В нашей модели используется обратная задача с зависимостью $P = P(x)$ в форме:

$$\varphi(x) = -\ln(P/P_{oc}) \quad (70)$$

Тогда, на основе формул:

$$h = h_{oc} - \frac{V_g^2}{2}; \quad G = \rho_m V_g A; \quad \rho_m = \frac{P \mu_m}{R_0 T}; \quad h = \frac{\sum_i H_i r_i}{\sum_i r_i \mu_i} \quad (71)$$

можно получить с использованием соотношения (20) следующие уравнения:

$$\frac{dV}{dx} = \frac{R_0 T}{V_g \mu_m} \varphi'(x) \quad (72)$$

$$T - T_{rf} - \frac{\sum_i [(h_{oc} - V_g^2/2) \mu_i - H_i^{rf}] r_i}{\sum_i C_{pi}^{rf} r_i} = 0 \quad (73)$$

В результате модель химически-неравновесного течения включает уравнения: (35, 72, 73) с начальными данными на входе в сопло: V_g^{oc} , γ_i^{oc} , T_{oc} , G . В ходе расчетов по алгоритму (п.1.6) определяются зависимости: $V(x)$; $\gamma_i(x)$; $T(x)$; $I_{yd}(x)$; $A(x)$; по длине сопла.

3.3 Модель двухфазного течения с коагуляцией и дроблением

В этой модели и соответствующей программе, разработанными Тишиным и др. [38], прогнозируются изменения размеров конденсированных частиц, их скоростей и температур по длине сопла. Основными допущениями модели являются:

- состав газовой фазы не изменяется;
- двухфазное течение является одномерным;
- частицы конденсата имеют сферическую форму;
- распределение частиц по диаметрам является дискретным и частицы представляются по группам с одинаковыми размерами внутри каждой группы;
- температура каждой частицы распределена равномерно по ее объему.

Модель учитывает следующие явления:

- дробление и коагуляция частиц в ходе столкновения между ними;
- различие между температурами газовой и конденсированной фаз;
- группы частиц имеют различные температуры и скорости;
- разницу между скоростью газа и скоростями частиц;

- потери удельного импульса из-за двухфазности.

Модель представляется системой обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dW_i}{dx} = \frac{3}{4} C_{xi} \rho_m \frac{|V_g - W_i| (V_g - W_i)}{W_i \rho_i d_i}; \quad (74)$$

$$\frac{dT_i}{dx} = \frac{6\alpha_i (T - T_i)}{d_i \rho_i W_i c_i}; \quad (75)$$

$$\rho_g V_g \frac{dV_g}{dx} + \frac{dP}{dx} + \frac{z}{1-z} \rho_g V_g \sum_{i=1}^{k_p} g_i \frac{dW_i}{dx} = 0; \quad (76)$$

$$c_p \frac{dT}{dx} + V_g \frac{dV_g}{dx} + \frac{z}{1-z} \sum_{i=1}^{k_p} \left(c_i \frac{dT_i}{dx} + W_i \frac{dW_i}{dx} \right) g_i = 0; \quad (77)$$

$$\frac{1}{P} \frac{dP}{dx} + \frac{1}{T} \frac{dT}{dx} - \frac{1}{\rho_g} \frac{d\rho_g}{dx} = 0; \quad (78)$$

$$\frac{dm_i}{dx} = \frac{1}{W_i} \sum_{j=1}^{i-1} k_{ij} n_j m_j; \quad (79)$$

$$\frac{dn_i}{dx} = -\frac{n_i}{W_i} \sum_{j=i+1}^{k_p} k_{ij} n_j; \quad (80)$$

$$\frac{dg_i}{dx} = \frac{(1-z)W_i^2}{z \rho_g V_g} \left(n_i \frac{dm_i}{dx} + m_i \frac{dn_i}{dx} \right); \quad i, j = 1, \dots, k_p; \quad (81)$$

где; $C_{xi} = \frac{21,12}{Re_i} + \frac{6,3}{\sqrt{Re_i}} + 0,25$; $\alpha_i = Nu_i \lambda / d_i$; $Nu_i = 2 + 0,46 Re_i^{0,55} Pr^{0,33}$; T_i , c_i , W_i –

температура, теплоемкость и скорость частиц i -ой группы; m_i , n_i , g_i – масса частицы, число частиц и массовая доля i -ой группы; C_{xi} , α_i , d_i , Re_i , ρ_i – коэффициент трения, коэффициент теплообмена, диаметр, относительное число Рейнолдса и плотность частиц i -ой группы; x – координата по длине сопла; k_{ij} – константа взаимодействия между частицами i -ой и j -ой групп; ρ_g , c_p , V_g – плотность, теплоемкость и скорость газовой фазы.

Система (74-81) включает $(5k_p + 3)$ уравнений (k_p – число групп частиц) с тем же числом неизвестных: W_i , T_i , m_i , n_i , g_i , V_g , T , ρ_g , значения которых на входе в сопло являются заданными. Также известным является распределение давления вдоль сопла. Для решения этой системы уравнений применяется метод Рунге-Кутты 4-го порядка.

3.4. Модели двумерного двухфазного течения и пограничного слоя

В модели двумерного двухфазного течения и соответствующей программе, созданной Рычковым [39], определяются характеристики течения в сужающейся и расширяющейся части сопла. Допущениями модели являются:

- состав продуктов сгорания не изменяется;
- влияние вязкости и теплопроводности, проявляющееся у стенок, не учитывается;
- конденсированные частицы имеют одинаковый диаметр и сферическую форму;
- на входе в сопло частицы и газ имеют одинаковые скорость и температуру.

Модель учитывает следующие явления:

- температурную и скоростную неравновесность между газом и частицами;
- разделение линий ($M = 1$) полей газа и частиц;
- возможность выпадения частиц на стенки сопла;
- потери удельного импульса из-за непараллельности течения.

В этой модели уравнения непрерывности, движения и энергии преобразуются в форму с безразмерными параметрами и координатами. В частности, течение газовой фазы описывается системой уравнений в частных производных:

$$\frac{\partial \vec{F}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{G}}{\partial \xi} = \vec{E}; \quad (82)$$

где:

$$F = \begin{bmatrix} \bar{m} \xi \bar{Y}_k^2 \\ (\bar{m}^2 / \bar{\rho} + B \bar{p}) \xi \bar{Y}_k^2 \\ \frac{\bar{m} \bar{n}}{\bar{\rho}} \bar{Y}_k^2 \\ H_0 \bar{m} \xi \bar{Y}_k^2 \end{bmatrix}; \quad G = \begin{bmatrix} A \xi \bar{Y}_k \\ \left(A \frac{\bar{m}}{\bar{\rho}} - B \bar{p} \xi \bar{Y}_k' \right) \xi \bar{Y}_k \\ \left(A \frac{\bar{n}}{\bar{\rho}} + B \bar{p} \right) \bar{Y}_k \\ A H_0 \xi \bar{Y}_k \end{bmatrix}; \quad E = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{\bar{n}}{\xi \bar{\rho}} \\ 0 \end{bmatrix}; \quad (83)$$

$$\bar{m} = \bar{\rho} \cdot \bar{V}_x; \quad \bar{n} = \bar{\rho} \cdot \bar{V}_y; \quad A = \bar{n} - \bar{m} \xi \bar{Y}_k^{-1}; \quad H_0 = \frac{n_f \bar{P}}{n_f - 1 \bar{\rho}} + \frac{\bar{m}^2 + \bar{n}^2}{2B \bar{\rho}^2}; \quad (84)$$

$$Y_k' = \frac{d\bar{Y}_k}{d\bar{x}}; \quad B = (n_f + 1) / n_f; \quad \xi = \frac{\bar{Y}}{\bar{Y}_k}; \quad (85)$$

$$\bar{x} = x / r_M; \quad \bar{Y} = Y / r_M; \quad \bar{\rho} = \rho_g / \rho_{oc}; \quad (86)$$

$$\bar{P} = P / P_{oc}; \quad \bar{V}_x = V_x / a_{кр}; \quad \bar{V}_y = V_y / a_{кр}; \quad (87)$$

$Y_k(x)$ – линия контура сопла, $a_{кр}$ – критическая скорость звука.

Граничными условиями являются:

- на входе в сопло: распределение величин $\bar{\rho}, \bar{V}_x, \bar{V}_y, \bar{P}$;

- на оси сопла: $\bar{n} = 0$; $\frac{\partial \bar{m}}{\partial \xi} = \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \xi} = \frac{\partial \bar{P}}{\partial \xi} = 0$;

- на стенке сопла: $\bar{n} = \bar{m} \cdot \bar{Y}_k$; (условие непроницаемости).

В дозвуковой области расчет выполняется с использованием метода установления по схеме Мак Кормака (для газа) и по схеме Рычкова (для конденсированной фазы) [40]. В сверхзвуковой области в расчете применяется схема Мак Кормака [41].

В модели расчета пограничного слоя определяется толщина потери импульса (δ_a^{**}) по методу Авдуевского [42], созданного для расчета пограничного слоя вдоль криволинейного профиля сопла. Предполагается, что этот слой включает только газовую фазу. Начальные данные для расчета $M(S)$ ($M(S)$ – число Маха вдоль стенки сопла), $P(S)$, $T(S)$, n_f (средний показатель адиабаты), μ_m (средняя молекулярная масса) берутся из результатов расчета двухмерного течения. Толщина δ_a^{**} и потери импульса из-за трения ΔI_{mp} вычисляются по формулам:

$$\delta_a^{**} = \frac{\left(\frac{2}{n_f - 1}\right)^{0,1}}{\text{Re}_{W_0}^{0,2}} \cdot \left[\frac{0,015}{T_{pr}^{0,5}}\right]^{0,8} \cdot \frac{\left(1 + \frac{n_f - 1}{2} M_a^2\right)^{\frac{n_f + 1}{2(n_f - 1)}}}{M_a^{\gamma + 1}} \cdot \frac{\bar{S}^{0,2}}{\bar{r}_a^2} \times \left\{ \int_0^{\bar{S}} \frac{(\bar{r})^{5/4} \cdot M^{\left(1 + \frac{5}{4}\gamma\right)} d\bar{S}}{\left(1 + \frac{n_f - 1}{2} M^2\right)^{\left(\frac{1,36n_f - 0,36}{n_f - 1}\right)}} \right\} \quad (88)$$

$$\delta_a^{**} = \bar{\delta}_a^{**} \cdot r_a; \quad \bar{r} = r/r_M; \quad (89)$$

$$\xi_{at} = \frac{2\bar{\delta}_a^{**}}{1 + 1/\left(n_f M_a^2\right)}; \quad (90)$$

$$\Delta I_{mp} = \xi_{mp} \cdot I_{u0}; \quad (91)$$

где: $\gamma = \frac{18}{7} \bar{T}_w - \frac{2}{7}$; $\text{Re}_{W_0} = W_{\max} L_c \rho_{oc} / \eta_w$; $W_{\max} = \sqrt{\frac{2n_f R_0}{n_f - 1} T_{oc}}$; $\bar{S} = \frac{S}{r_M}$; $\bar{T}_w = T_w / T$;

L_c – длина сопла; S – координата вдоль профиля сопла; M_a и r_a – число Маха и радиус на выходе из сопла; η_w – вязкость газа у стенки.

3.5 Краткое описание пакета «СОПЛО» и пример расчета

Представленные модели и соответствующие им программные модули, написанные на языке Fortran 90 были объединены в пакет «Сопло», в котором каждый модуль обозначим символом:

T – химически-равновесное течение (идеальная схема);

K – химически-неравновесное течение;

G – двухфазное течение с коагуляцией и дроблением;

D, S – двумерное двухфазное течение с постоянным диаметром частиц (\bar{d}_p) вместе с расчетом пограничного слоя; по модулю D выполняется расчет в до- и трансзвуковой части сопла до сечения X_{DS} (Фиг.10), а по модулю S – расчет в сверхзвуковой части после этого сечения.

По каждому модулю можно выполнить отдельный расчет. В этом случае начальными данными являются:

- для модуля Т: $x_k, Y_k, P_{oc}, b_{it}, h_T, B_q$, где B_q - символы веществ реагирующей среды;
- для модуля К: начальные данные модуля Т + R_j , где R_j – механизм химических реакций в символьной форме (Таблица 2);
- для модуля G: $x_k, Y_k, P_{oc}, \bar{d}_p^0$ (если начальное значение среднего диаметра частиц не равно автоматически заданному в программе $\bar{d}_p^0=5\mu\text{к}$), n_f, μ_m ;
- для модулей D, S: $x_k, Y_k, P_{oc}, \bar{d}_p, n_f, \mu_m, \bar{T}_w$ и распределение скоростей на входе в сопло ($V_{x0}, V_{y0}, W_{x0}, W_{y0}$). Если распределение скоростей является равномерным, то значения осевой и вертикальной компоненты скорости конденсированной фазы W_{x0} и W_{y0} не задаются.

При выполнении комбинированного расчета (по нескольким модулям одновременно) модули взаимодействуют между собой через входные и выходные данные, что уменьшает объем исходной информации. Например, для полного варианта расчета (TKGDS*) требуются только начальные данные, необходимые для К-модуля + \bar{T}_w , т.к.:

- значения n_f и μ_m для модулей G, D или S определяются в модулях Т или К;
- значение \bar{d}_p для модулей D и S определяются в модуле G.

В результате расчета определяются:

- в модуле Т: $r_i(x), I_{ud}(x), z(x), T(x), P(x), \mu_m(x)$ и термодинамические и теплофизические свойства;
- в модуле К: те же самые характеристики, что и в модуле Т (но используя химически-неравновесную модель) и ξ_{np} ;
- в модуле G: $d_{pi}(x), \Delta V_i(x), \Delta T_i(x), \xi_{дв}$, где $\Delta V_i = V_g - W_i$; $\Delta T_i = T_g - T_i$;
- в модулях D, S: $V_x(x, Y), T(x, Y), \rho(x, Y), V_y(x, Y), W_x(x, Y), T_c(x, Y), W_y(x, Y), \rho_c(x, Y), \delta^{**}, \xi_{ин}, \xi_{тр}, \xi_{кс}$ (T_c – температура конденсированных частиц);
- значение реального удельного импульса (69).

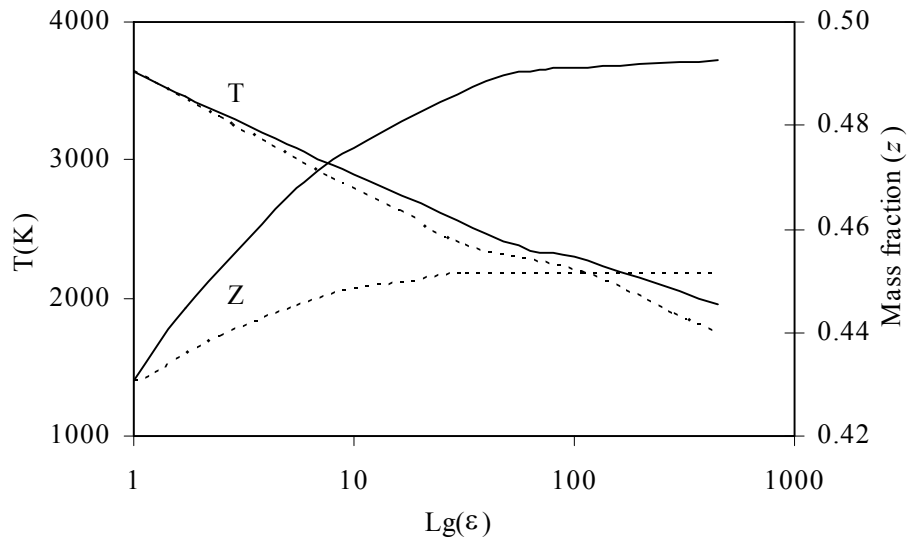
В качестве примера показаны результаты расчета течения продуктов сгорания твердого топлива [43] с условной формулой: $C_{10,876}H_{46,546}O_{25,806}N_{6,781}CL_{1,517}AL_{9,665}$ (энтальпия $h_T = -1046\text{кДж/кг}$) при давлении $P_{oc} = 70\text{атм}$. Координаты контура сопла показаны в Таблице 6 ($r_M = Y_M = 50\text{мм}$).

Таблица 6. Координаты контура сопла.

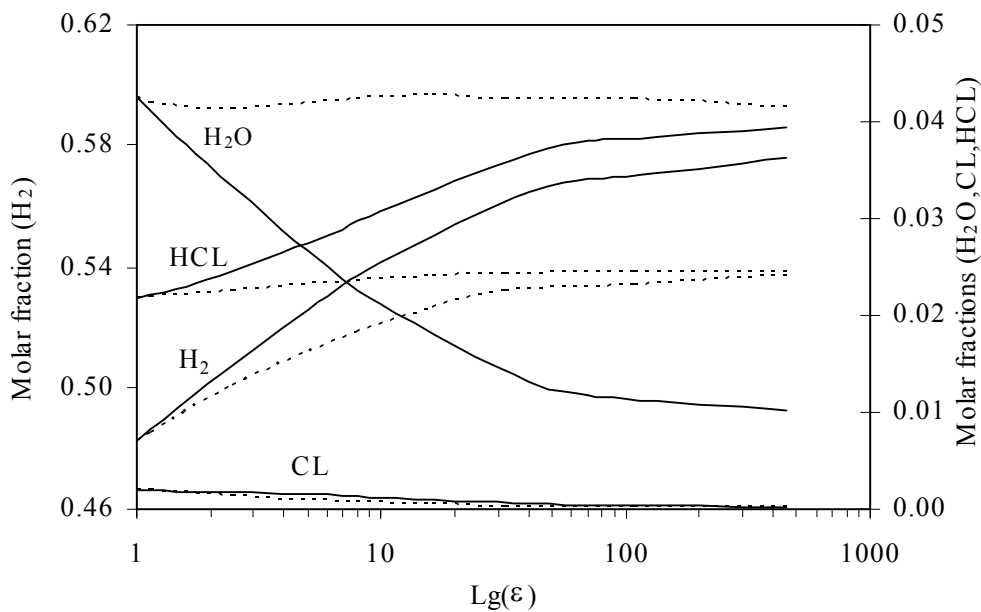
$x_k(\text{мм})$	0	100	150	200	220	278	354	524	640	944
$Y_k(\text{мм})$	150	100	60	50	62	98,6	142,2	220	264	348

Реагирующая среда включает 41 вещество: H, O, C, AL, N, CL, H₂, O₂, H₂O, CO, CO₂, OH, HO₂, HCO, H₂CO, CH, CH₂, CH₃, CH₄, ALH, ALOH, ALHO₂, ALO, AL₂O, ALO₂, ALCL, HCL, CL₂, CLO, CLO₂, HOCL, CLCO, N₂, NO, N₂O, NH₃, NH₂, NH, HNO, NO₂, AL₂O₃* между которыми протекают 123 элементарных реакций [23, 33]. Расчет был выполнен по полному варианту - код TKGDS*. В ходе химически-равновесного расчета были получены значения степени расширения по давлению $\varepsilon_a = P_{oc}/P_a = 452$, среднего коэффициента адиабатического расширения $n_f = 1,126$, средней молекулярной массы $\mu_M=25,90$ и температуры в камере сгорания $T_{oc} = 3645\text{К}$. На Фиг. 11 и 12 показаны некоторые результаты, полученные по модулям Т и К. Как видно, химически-равновесный состав продуктов сгорания, включая конденсированную фазу (AL₂O₃*) меняется значительно, особенно при расчете химически-равновесного течения. Например, мольная доля H₂ изменяется от $r_{H_2}^{oc} = 0,48$ до $r_{H_2}^a = 0,57$ а конденсированная фаза от $z_{oc}=0,43$ до $z_a = 0,49$. Этот эффект обусловлен значительной

диссоциацией продуктов сгорания на входе в сопло из-за высокой температуры T_{oc} . Но по мере ее уменьшения происходит рекомбинация атомов радикалов в молекулярные вещества. Однако расчет, выполненный по модулю К, показывает меньшее изменение состава по длине сопла, т.к. в этом модуле учитываются конечные значения скоростей химических реакций. Например, значение r_{H_2} увеличивается от $r_{H_2}^{oc} = 0,48$ до $r_{H_2}^a = 0,53$, а значение z : от $z_{oc} = 0,43$ до $z_a = 0,45$. В результате появляются потери удельного импульса из-за химической неравновесности, составляющие для рассчитываемого варианта $\xi_{dq} = 2\%$. Небольшой горизонтальный участок при $T \approx 2300K$, наблюдаемый при расчете по обоим модулям, вызван превращением конденсированного $Al_2O_3^*$ из жидкой фазы в твердую.



Фигура 11. Изменение температуры и массовой доли конденсата z по длине сопла (— модуль Т; - - -модуль К)

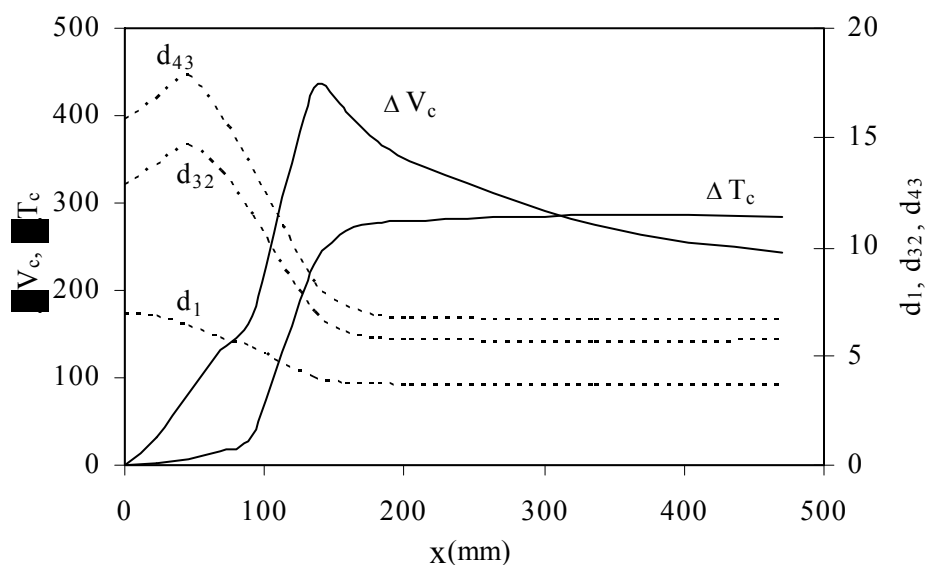


Фигура 12. Изменение мольных долей H_2 , H_2O CL, HCL по длине сопла (— модуль Т; - - -модуль К)

При расчете по модулю К были получены несколько другие значения среднего показателя адиабатического расширения ($n_f = 1,114$) и молекулярной массы ($\mu_M = 25,62$), которые в дальнейшем были использованы в модулях G, D и S.

При расчете по модулю G использовался стандартный вариант задания распределения частиц конденсированной фазы, а именно: $d_{min} = 2 \mu\text{к}$; $d_{max} = 25 \mu\text{к}$; $\bar{d}_p^0 = 5 \mu\text{к}$ (начальный средний диаметр); $\sigma_s = 2$ (среднее квадратичное отклонение) и $k_p = 10$ (число групп частиц). На Фиг. 13 показаны изменения усредненных диаметров частиц [16]: по длине сопла: d_1 (по числу частиц); d_{32} (по поверхности частиц) и d_{43} (по массе частиц). Вначале при дозвуковых скоростях проявляется небольшой эффект коагуляции частиц, затем в транзвуковой области ($0.7 < M < 1.2$) происходит резкое уменьшение диаметров частиц из-за дробления и наконец в сверхзвуковой области устанавливается равновесие между процессами коагуляции и дробления.

Средние разности по скоростям $\Delta \bar{V} = |V_g - W_c|$ и температурам $\Delta \bar{T} = |T_g - T_c|$ возрастают в дозвуковой части сопла, достигая наибольших значений в районе минимального сечения. В сверхзвуковой области величины $\Delta \bar{V}$ и $\Delta \bar{T}$ уменьшаются, приходя затем к практически постоянным значениям ($\Delta \bar{V} = 250 \text{ м/с}$; $\Delta \bar{T} = 300 \text{ К}$). В этом расчете потери удельного импульса из-за двухфазности являются высокими ($\zeta_{\text{об}} = 3,6\%$), из-за наличия значительной доли конденсата z.



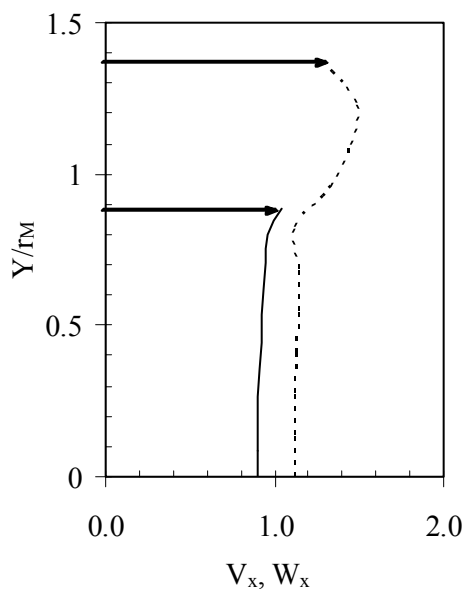
Фигура 13. Изменение $\Delta \bar{V}$, $\Delta \bar{T}$, d_1 , d_{32} , d_{43} по длине сопла (модуль G)

При расчетах по модулям D и S принимается, что $\bar{T}_w = 0,5$, $\bar{d}_p = d_{43}$, где d_{43} получается из модуля G для минимального сечения. Фигуры 14 и 15 показывают распределения относительных осевых скоростей газа \bar{V}_x и конденсированной фазы \bar{W}_x для сечения X_{DS} (Фиг. 14) и на выходе из сопла. (Фиг. 15). Положение сечения X_{DS} получается автоматически в модуле D ($\bar{X}_{DS} = X_{DS}/r_M = 0,6223$) из условия $\min(M_x \geq 1,05)$. На Фиг. 14 можно отметить, что:

- скорости \bar{V}_x на оси сопла ($\bar{V}_x = 1,05$) значительно отличаются от скоростей на его периферии ($\bar{V}_x = 1,5$);
- конденсированная фаза занимает только часть сечения ($\bar{Y}_{DS} = Y_{DS}/r_M = 0,8$), не достигая в “горле” скорости звука ($\bar{W}_x = 0,9$).

Для распределения \bar{V}_x и \bar{W}_x на выходе сопла (Фиг. 15) можно отметить, что:

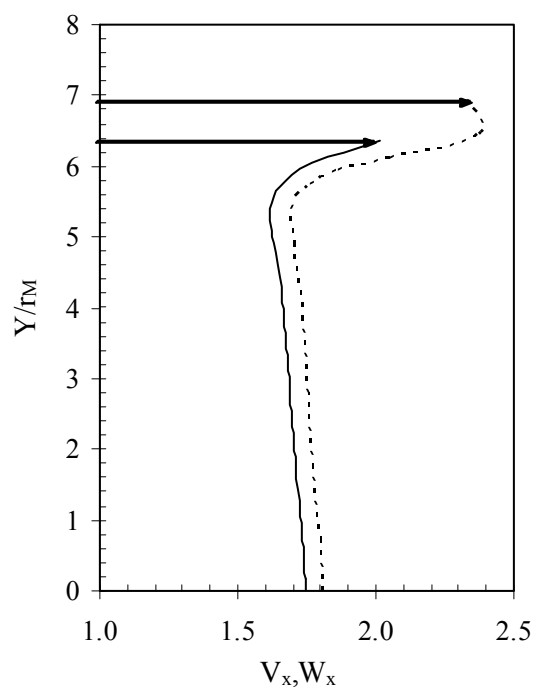
- разница $|\bar{V}_x - \bar{W}_x|$ почти постоянна;
- до значения $\bar{Y} \approx 5$ распределения \bar{V}_x и \bar{W}_x почти равномерны;
- но около стенки распределения этих скоростей становятся неравномерными (например, в области $\bar{Y} \approx 5 \div 7$ скорость \bar{V}_x изменяется в интервале $\bar{V}_x = 1,8 \div 2,4$);
- конденсированная фаза занимает почти все выходное сечение.



Фигура 14. Распределение осевых скоростей

\bar{V}_x и \bar{W}_x в сечении X_{DS}

(модуль D: - - - для \bar{V}_x ; — для \bar{W}_x)



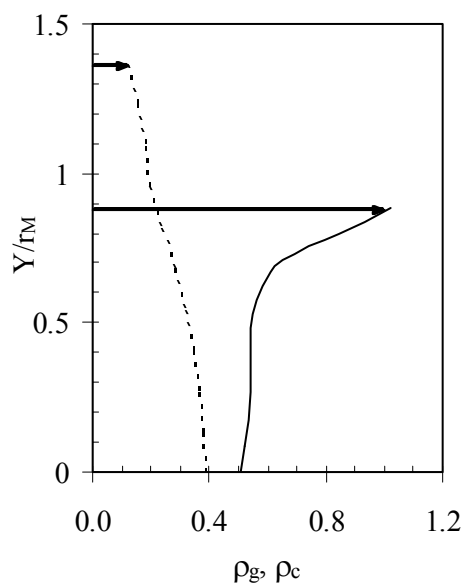
Фигура 15. Распределение осевых скоростей

\bar{V}_x и \bar{W}_x на выходе из сопла.

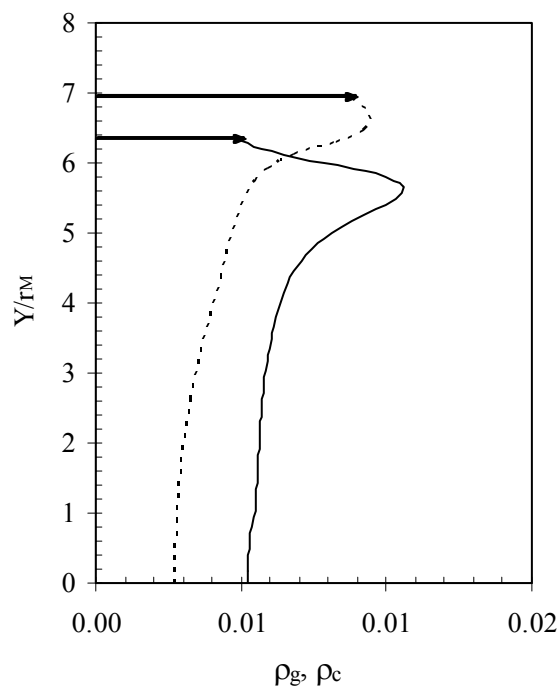
(модуль S: - - - для \bar{V}_x ; — для \bar{W}_x)

Для тех же сечений на Фиг. 16 и 17 показаны распределения относительных плотностей газа ($\bar{\rho}_g$) и конденсированной фазы ($\bar{\rho}_c$). В сечении X_{DS} с увеличением \bar{Y} плотность $\bar{\rho}_g$ уменьшается от 0,4 до 0,15 в то время как значение $\bar{\rho}_c$ достигает максимума на периферии течения, что означает значительную концентрацию частиц в этой зоне. Аналогичное распределение для конденсированной фазы наблюдается на выходе (Фиг. 17), однако распределение $\bar{\rho}_g$ показывает максимальное значение в области периферии сопла.

При расчете по модулям D и S также определялись потери удельного импульса: из-за рассеяния ($\zeta_{nn} = 1,84\%$) и трения ($\zeta_{mp} = 0,647\%$). Таким образом, в результате расчета по полному варианту TKGDS* были определены суммарные потери $\zeta_{\Sigma} = 7,1\%$ и реальное значение удельного импульса $I_{y0} = 3206\text{м/с}$. Конденсат на стенку сопла не выпадает.



Фигура 16. Распределение $\bar{\rho}_g$ и $\bar{\rho}_c$
в сечении X_{DS}
(модуль D: - - - для $\bar{\rho}_g$; — для $\bar{\rho}_c$)

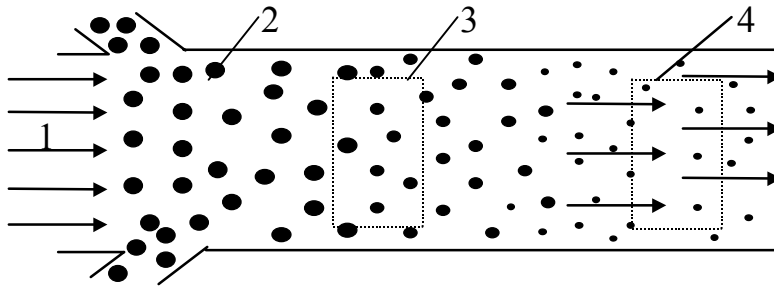


Фигура 17. Распределение $\bar{\rho}_g$ и $\bar{\rho}_c$
на выходе из сопла
(модуль S: - - - для $\bar{\rho}_g$; — для $\bar{\rho}_c$)

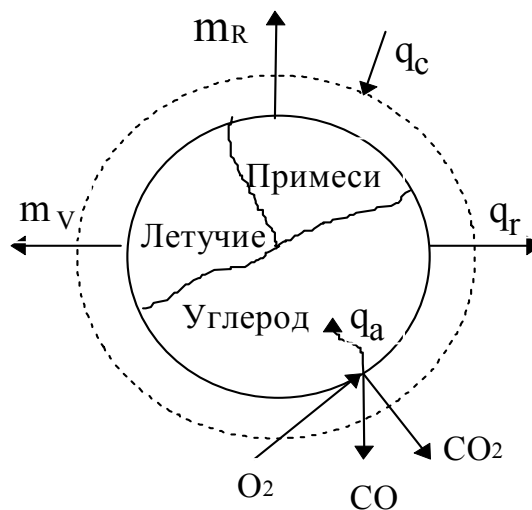
Численный пример, приведенный для продуктов сгорания топлива типа: (C+H+O+N+CL+AL) показал, что пакет может быть полезен для прогнозирования многих практически важных характеристик, необходимых для проектирования двигателей. В 80-х годах этот пакет, реализованный для ЭВМ типа ЕС, широко использовался на ряде предприятий специализированного машиностроения. В настоящее время пакет “Сопло” усовершенствован и адаптирован к современным персональным компьютерам.

4. Математическая модель горения распыленного угля

Уголь – это один из принципиальных источников энергии следующих десятилетий и в настоящее время существует и разрабатывается множество типов энергоустановок для его сжигания. В частности широко используются топки с горением дисперсного угля в трактах с почти одномерным потоком воздуха [44]. Теоретические и экспериментальные исследования таких течений приведены во многих работах (например, [45, 46, 47]). Однако из-за сложности картины процесса эта проблема еще далека от своего решения, особенно в части создания комплексных моделей, которые учитывали бы основные явления (свойственные газо-угольным потокам) в их взаимодействии. Необходимым для моделей и программ расчета газо-угольных потоков является также свойство инвариантности относительно реагирующей среды, т.к. угли имеют сложные составы, значительно отличающиеся друг от друга в зависимости от месторождения. В этом разделе представлена одна из таких разработок, основанная на базовых: математической модели, алгоритме и программе (п.1). Принципиальная схема процессов учитываемых в комплексной модели показана на Фиг. 18 и 19.



Фигура 18. Схема горения распыленного угля в реагирующем потоке: 1 – нагретый воздух; 2 – частицы угля; 3, 4 – движущийся реагирующий объем (газ + частицы)



Фигура 19. Структура угольной частицы и схема ее горения

На вход в канал (Фиг. 18) подается нагретый окислитель (воздух) а также частицы угля малого размера ($d_p = 50...100\mu\text{к}$), включающие в общем случае (Фиг. 19): летучие вещества, углерод и минеральные негоряемые примеси (инертные вещества). При движении по каналу частицы сначала нагреваются от газовой фазы (q_c), затем выделяются летучие компоненты (H_2 , CH_4 , C_6H_6 и т.д.) и происходит горение углерода на поверхности с нагревом частицы (q_a) и с образованием CO и CO_2 . Сначала формируется CO_2 , но с повышением температуры частицы (T_p) увеличивается доля CO . По мере выгорания углерода, примеси могут также выноситься в газовую фазу, где протекает множество химических реакций. В результате увеличивается температура газа (T_g) и частиц, между ними происходит теплообмен (конвекцией и радиацией), а также растет расход газовой фазы и уменьшается d_p .

4.1. Физическая схема и математическая модель

В ходе анализа доступной литературы [45, 48, 49, 50 и др.] была разработана физическая схема горения распыленного угля, учитывающая следующие явления в их взаимодействии: химические реакции в газовой фазе; изменение T_g и скорости потока (V_g); образование летучих веществ и горение углерода; эмиссия примесей и изменение состава газовой фазы за счет этих факторов; нагрев частиц; влияние концентрации окислителя на скорость их горения; переменное соотношение между CO и CO_2 , образующихся при сгорании углерода; теплообмен между частицами и газом из-за конвекции и радиации.

В схеме принимаются следующие допущения: газо-угольный поток является одномерным и скорость частиц равна скорости газа; частицы имеют одинаковый диаметр, сферическую форму и не взаимодействуют между собой; внутри частицы коэффициент теплопроводности $\lambda = \infty$; конденсированные инертные вещества выходят в газовую фазу пропорционально скорости сгорания углерода; давление в канале (P) – постоянно.

При создании комплексной модели, кроме базовых фрагментов (п.1), были привлечены результаты, представленные в работах [45, 48, 49]. Содержание компонент в частице угля характеризуется относительными долями:

$$\bar{G}_V = \frac{f_p m_V}{G_\Sigma}; \quad \bar{G}_C = \frac{f_p m_C}{G_\Sigma}; \quad \bar{G}_R = \frac{f_p m_R}{G_\Sigma}; \quad (92)$$

где: $G_\Sigma = (G_p + G_g) = const.$; m_p - масса частицы; m_V, m_C, m_R - массы летучих веществ, углерода и примеси в одной частице, соответственно; N_p - количество частиц в единице объема; $G_p = m_p N_p V_g$; $N_p V_g = f_p = const.$ (т.к. предполагается, что площадь канала не меняется).

Математическая модель включает следующие уравнения:

1. Уравнение расхода летучих веществ [48]:

$$\frac{d\bar{G}_V}{dx} = -\frac{\bar{G}_V}{V_g} (0,4K_1 + 0,8K_2) \equiv f_V; \quad (93)$$

где: $K_1 = B_1 \exp(-E_1 / R_o T_p)$, $K_2 = B_2 \exp(-E_2 / R_o T_p)$; B_1, B_2, E_1, E_2 - кинетические параметры.

2. Уравнение выгорания углерода [49]:

$$\frac{d\bar{G}_C}{dx} = -\frac{4,836}{V_g} P_{O_2}^{0,5} A_k \left[\exp\left(\frac{-E_k}{R_o T_p}\right) \right] \cdot \left(\frac{f_p}{G_\Sigma}\right)^{\frac{1}{3}} \times \left(\frac{\bar{G}_C}{\rho_C}\right) / \left(\sum_s \frac{\bar{G}_s}{\rho_s}\right) \equiv f_C; \quad (94)$$

где: A_k и E_k - кинетические параметры; $s \subset V, C, R$.

3. Уравнение расхода инертных веществ:

$$\frac{d\bar{G}_R}{dx} = f_C \frac{\bar{G}_R}{\bar{G}_C} \frac{\rho_C}{\rho_R} \equiv f_R \quad (95)$$

4. Уравнение температуры частицы (модификация аналогичного уравнения из [45]):

$$\begin{aligned} \frac{dT_p}{dx} = & \frac{4,836 \left(\frac{f_p}{G_\Sigma}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\sum_s \frac{\bar{G}_s}{\rho_s}\right)^{\frac{2}{3}} [\bar{h}(T_g - T_p) - \sigma \varepsilon (T_p^4 - T_k^4)]}{\bar{c} (\bar{G}_V + \bar{G}_C + \bar{G}_R)} + \\ & + \frac{f_V L_V - f_C \left[(1 - \varphi) \frac{\Delta H_{CO}^+}{\mu_C} + \varphi \frac{\Delta H_{CO_2}^+}{\mu_C} \right]}{\bar{c} (\bar{G}_V + \bar{G}_C + \bar{G}_R)} \equiv f_{T_p} \end{aligned} \quad (96)$$

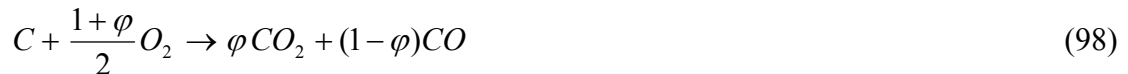
где: $\bar{c} = \frac{\sum_s \bar{G}_s \cdot c_s}{\sum_s \bar{G}_s}$ - средняя теплоемкость частицы; \bar{h} - средний коэффициент конвективной

теплоотдачи от газа к частице; σ - константа Стефана-Больцмана; T_k - температура стенки канала.

5. Уравнение для степени образования CO_2 (φ) при горении углерода [49]:

$$\frac{1-\varphi}{\varphi} - A_\varphi \exp(-E_\varphi / R_o T_p) = 0 \quad (97)$$

где: A_φ, E_φ - экспериментальные коэффициенты; переменная φ отражается в гетерогенной реакции:



и $\varphi = 1$, если углерод полностью превращается в CO_2 .

6. Уравнения изменения состава газовой фазы в экспоненциальной форме (35).

7. Калорическое уравнение (20), связывающее температуру, состав и энтальпию газа (h_g).

8. Уравнение сохранения массы для всего течения:

$$\sum_s \bar{G}_s + \frac{P\mu_g}{R_o T_g} \frac{V_g}{G_\Sigma} - \frac{P\mu_g}{R_o T_g} \cdot \sum_s \frac{\bar{G}_s}{\rho_s} - 1 = 0; \quad (99)$$

9. Уравнение сохранения энергии для всего течения:

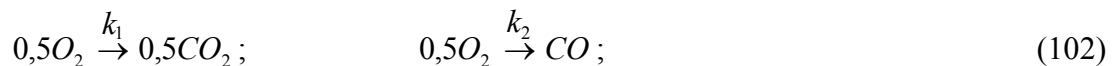
$$\sum_s h_s \bar{G}_s + \frac{h_g P\mu_g V_g}{R_o T_g G_\Sigma} - \frac{h_g P\mu_g}{R_o T_g} \sum_s \frac{\bar{G}_s}{\rho_s} - \frac{h_\Sigma}{G_\Sigma} = 0 \quad (100)$$

В математической модели в соответствии с подходом, изложенным в (п.1), массообмен между частицами угля и газовой фазой представляется в форме реакций массообмена:

а) выход летучих веществ имитируется набором реакций $\rightarrow V_i$ (где V_i - символ i -го летучего вещества) с константами скорости:

$$k_{V_i} = 0,001 \frac{g_{V_i}}{\mu_i} \frac{G_\Sigma f_V}{1 - \sum_s \bar{G}_s} \quad (101)$$

б) горение углерода на поверхности частиц представляется 2-мя реакциями:



с константами скорости:

$$k_1 = 2\varphi k_C; \quad k_2 = (1-\varphi)k_C; \quad (103)$$

где: $k_C = 9,06 \cdot 10^{-3} \frac{A_r}{\mu_C} A_k T_g^{0,5} \exp\left(\frac{-E_k}{R_o T_p}\right)$; $A_r = \frac{f_p}{V_g} A_p^C$ и A_p^C - часть поверхности частицы, занятая углеродом.

с) эмиссия инертных примесей $0,5O_2 \xrightarrow{k_{3i}} R_i + 0,5O_2$, с константами скорости:

$$k_{3i} = k_C g_{R_i} \left(\frac{\mu_C \bar{G}_R \rho_C}{\mu_{R_i} \bar{G}_C \rho_R} \right) \quad (104)$$

Детали вывода формул для констант скоростей представлены в [51]. В итоге математическая модель содержит $(n_b + 8)$ дифференциальных и алгебраических уравнений с таким же количеством неизвестных: $\gamma_i, \bar{G}_V, \bar{G}_C, \bar{G}_R, T_p, T_g, V_g, H_g, \varphi$. Алгоритм расчета практически совпадает с описанным в п.1.6. Подробности алгоритма решения с представлением частных производных якобиана изложены в [52].

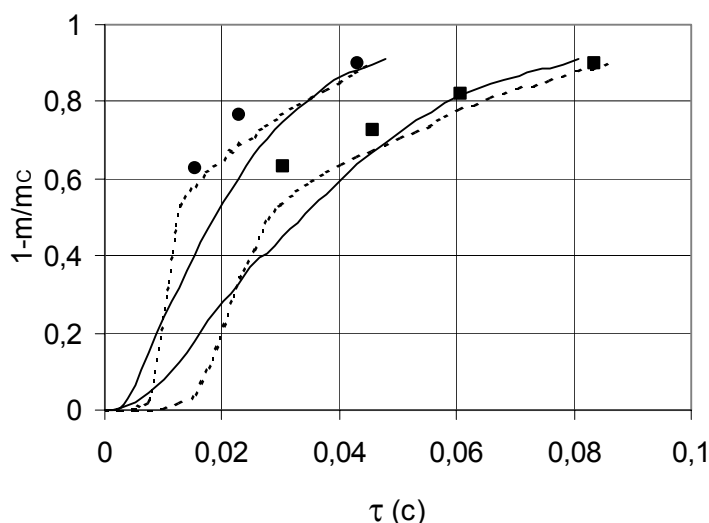
4.2. Сравнение с экспериментальными данными

На базе вышеприведенной модели и алгоритма расчета была создана инвариантная программа, по которой выполнялись численные исследования и сравнение с экспериментальными [53] и теоретическими данными других авторов [50, 54]. Характеристики угля для этого сравнения представлены в Таб. 7.

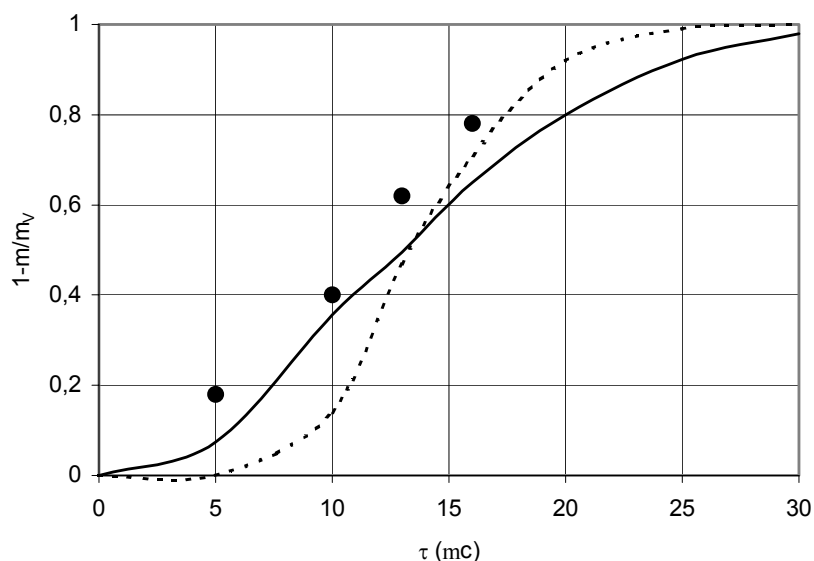
Таблица 7 Характеристики угля при сравнении с экспериментами (ФУ – фиксированный углерод, ΔH_{y2} – высшая теплота сгорания угля)

Суммар. Состав (%)			Летучие вещества – ЛВ (%)					Примеси–ПР(%)		ΔH_{y2}
ЛВ	ФУ	ПР	CH ₄	C ₆ H ₆	O ₂	CO	CO ₂	Al ₂ O ₃	SiO ₂	МДж/кг
46.54	49.41	4.05	43.75	41.25	3.75	7.50	3.75	60	40	30.59

В экспериментах [53] температура и состав газовой фазы (воздух) поддерживались неизменными, что в нашей модели имитировалось высоким коэффициентом избытка окислителя ($\alpha_{ок} = 30$). Сравнение проводилось для 2-х температур $T_g = 1400K$ и $T_g = 1900K$ при $P = 1$ атм. Частицы угля имели диаметр $d_p = 55\mu m$ при начальной температуре $T_p = 600K$.



Фигура 20. Степень выгорания углерода в зависимости от времени: (—) – наша модель; (• - $T_g = 1400K$; ■ - $T_g = 1900K$) – эксперимент [53]; (- - -) – модель [50].

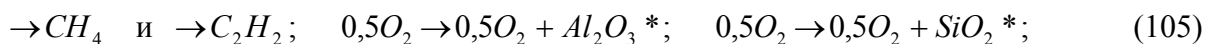


Фигура 21. Эмиссия летучих веществ в зависимости от времени при $T_g = 1900\text{K}$:
 (—) – наша модель; (•) – эксперимент [50]; (- - -) – модель [54].

На Фигурах 20 и 21 приведено сравнение между экспериментальными и теоретическими данными по относительным массам углерода (Фиг. 20) и летучих веществ (Фиг.21). Можно отметить удовлетворительное совпадение сравниваемых результатов.

4.3. Численные исследования

При численных исследованиях в качестве окислителя принимался воздух (с условной формулой $N_{7,8}O_{2,2}$), а горючим являлся каменный уголь, состоящий из 20% летучих веществ, 70% углерода и 10% примесей. Предполагалось, что летучие включают: CH_4 (метан) = 70% и C_2H_2 (ацетилен)=30%, а инертные вещества состоят из: $Al_2O_3^*$ (60%) и SiO_2^* (40%). Газовая среда включала вещества: N, N_2 , NO, NO_2 , NH, NH_2 , NH_3 , HNO, H_2O_2 , N_2O , H, H_2 , O, O_2 , C, CO, H_2O , OH, CH_4 , CH_2 , CH_3 , HCO, H_2CO , C_2H , NO_2 , C_2H_6 , C_2H_5 , C_2H_3 , C_2H_4 , C_2H_2 , CO_2 , Al, Si, $Al_2O_3^*$, SiO_2^* (* - признак конденсированного вещества), между которыми протекает 128 реакций. Механизм реакций был выбран на основе работ [34, 55]. В этот механизм были также включены реакции массоподвода, отражающие горение угля на поверхности частицы (102), а также выход летучих и примесей:



Для базового режима были выбраны следующие исходные данные в начальном сечении канала ($x = 0$): $G_p^0 = 0,01 \text{ кг/с}$; $\alpha_{ок}^f = 1,2$; $d_p^0 = 100 \mu\text{м}$; $T_g^0 = 1200 \text{ K}$; $T_p^0 = 300 \text{ K}$; $V_{g0} = 0,4 \text{ м/с}$; $\varepsilon = 0,8$; $P = 1 \text{ атм.}$; $\Delta H_{y2} = 30 \text{ МДж/кгмоль}$. При описании базового режима (сплошные линии на Фиг. 22) можно выделить следующие этапы:

- нагревание частицы угля ($x = 0 \dots 5 \text{ см}$). Здесь практически происходит только нагрев частиц с 300K до 1150K за счет тепла газовой фазы с некоторым понижением T_g ;

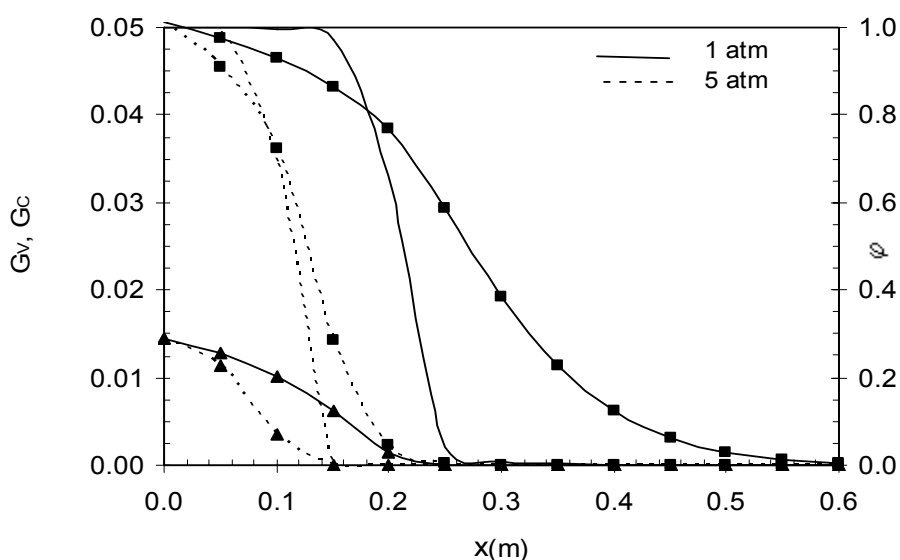
- эмиссия летучих веществ ($x=5...15\text{см}$). Здесь преимущественно протекают эндотермические реакции образования летучих веществ (C_2H_2 и CH_4) внутри частицы и их эмиссия в газовую фазу, где они вступают в экзотермические реакции с окислителем, увеличивая T_g . При этом T_p возрастает за счет теплопередачи из газовой фазы. В конце этапа начинает выгорать углерод;

- выгорание углерода с образованием CO_2 ($x = 15...26\text{см}$). Здесь заканчивается выход летучих веществ и на поверхности частицы интенсивно протекает реакция (98). Ввиду невысоких температур ($T_p = 1300\text{К}...1700\text{К}$) значение $\varphi \approx 1$, т.е. образуется преимущественно CO_2 и все выделяемое тепло ($\Delta H_{\text{CO}_2}^+ = 94 \text{ ккал/гмоль}$) расходуется на нагрев частиц, что резко увеличивает их температуру. В то же время появление CO_2 в газовой фазе не увеличивает T_g . Поэтому в конце этапа T_p становится больше T_g , достигая превышения $\Delta T_{.m} = (T_p - T_g)_{\text{max}} \approx 60\text{К}$.

- выгорание углерода с образованием CO ($x = 26...40\text{см}$). Здесь уже $\varphi \rightarrow 0$, т.е. в результате поверхностной реакции (98) образуется CO и на нагрев частицы расходуется меньшее количество тепла, чем на предыдущем этапе ($\Delta H_{\text{CO}}^+ = 26,4 \text{ ккал/гмоль}$). По выходе в газовую фазу CO будет окисляться до CO_2 с выделением значительного количества тепла ($\Delta Q = \Delta H_{\text{CO}_2}^+ - \Delta H_{\text{CO}}^+ = 67,4 \text{ ккал/гмоль}$), что приводит к увеличению T_g . В результате температуры газа и частиц сравниваются в конце этапа. К этому моменту выгорает уже 90% углерода;

- установление равновесия ($x = 40...60\text{см}$). Здесь заканчивается выгорание углерода и реагирующая смесь приходит в химическое равновесие. На этом этапе темп выгорания уменьшается, т.к. парциальное давление P_{O_2} значительно меньше первоначального.

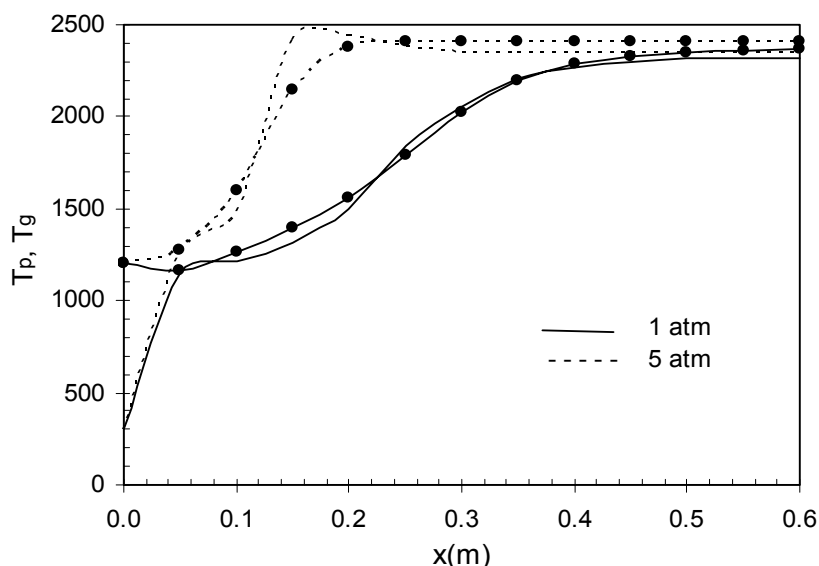
Влияние давления на процесс горения. Для оценки этого влияния были выполнены расчеты при различных давлениях в диапазоне $P = 1...10\text{атм}$. Фигура 22 показывает изменение по длине канала относительного содержания летучих веществ и углерода в частице угля, а также изменение величины φ для $P = 1$ и 5атм . Как видно, скорость эмиссии летучих веществ на начальном этапе практически не зависит от давления (до $x = 5\text{см}$), но затем (для варианта $P= 5\text{атм}$) значительно увеличивается из-за ускорения роста T_p .



Фигура 22. Изменение величин \bar{G}_C, \bar{G}_V и функции φ вдоль канала при $P = 1$ и 5атм ;

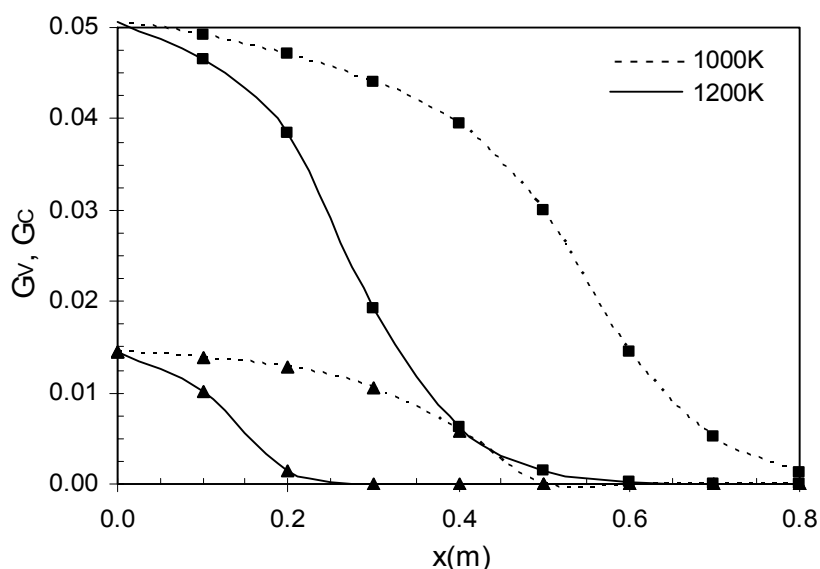
■ - \bar{G}_C , ▲ - \bar{G}_V , φ - линии без маркеров.

Дело в том, что с ростом давления химические реакции в газовой фазе протекают более интенсивно и кроме того, горение частиц угля происходит быстрее, т.к. становится выше P_{O_2} . В результате температуры T_g и T_p увеличиваются быстрее, чем при $P = 1 \text{ атм}$. (Фиг.23). По причине ускорения реакций на поверхности частицы отмечается также высокое значение $\Delta T_m(P=5 \text{ атм})=300\text{К}$ в сравнении с $\Delta T_m(P=1 \text{ атм}) = 60\text{К}$.



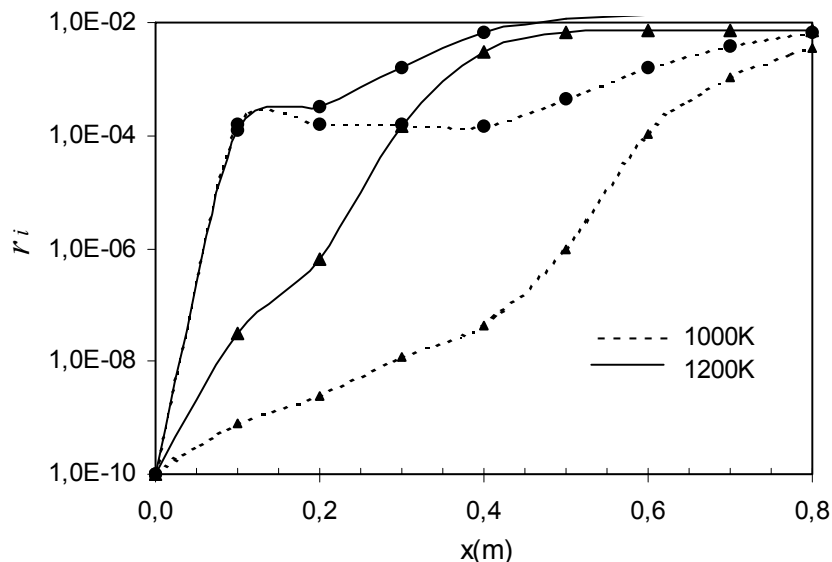
Фигура 23. Изменение температуры газа и частицы вдоль канала при 1 и 5 атм.
 • - T_g ; T_p – линии без маркеров.

Влияние начальной температуры газа. Это влияние было определено в интервале температур от 700К до 1300К. На Фигуре 24 показано изменение значений \bar{G}_C , \bar{G}_V для начальных температур $T_g^0 = 1000\text{К}$ и 1200К . Как видно по этой фигуре, уменьшение T_g^0 на 200К (принципиально сохраняя характер процессов) увеличивает в 2 раза время горения, что показывает огромную роль начальной температуры на скорость сгорания частиц угля.



Фигура 24. Изменение величин \bar{G}_C , \bar{G}_V при $T_g^0 = 1000\text{К}$ и 1200К (■ - \bar{G}_C , ▲ - \bar{G}_V)

На Фигуре 25 сравниваются изменения концентраций NO и CO для $T_g^0 = 1000K$ и $1200K$. Видно, что с уменьшением температуры T_g^0 концентрация этих веществ в конце канала уменьшается, приближаясь к химически-равновесным значениям на заключительном этапе горения.



Фигура 25. Изменение мольных долей CO и NO при $T_g^0 = 1000K$ и $1200K$ ▲ - NO ; ● - CO

Расчет для начальной температуры $T_g^0 = 800^\circ K$ показал, что при длине канала $x = 2m$ горение частиц практически не происходит, т.е. эта температура является недостаточной для возгорания частиц.

Численные исследования показали полезность модели и как результат можно отметить:

- возможность прогнозирования эмиссии вредных веществ;
- резкий переход от фазы формирования CO_2 к фазе образования CO на поверхности угольной частицы;
- существования зоны, когда температура частицы выше температуры газа;
- повышение скорости сгорания угольных частиц с увеличением давления;
- существенное влияние начальной температуры газа на скорость сгорания частиц.

Заключение

В работе представлено некоторое “ядро” моделирования химически-неравновесных процессов, созданное в рамках реакторного подхода. Это “ядро” включает: фрагменты для физической схематизации; уравнения изменения состава реагирующей среды; алгоритм расчета, основанный на методе Пирумова и программное обеспечение - пакет NERCHIM. Пакет содержит: базу данных (по веществам и реакциям), блок формирования уравнений химической кинетики на основе символьной записи реакций, ряд инвариантных программ расчета, модуль переаппроксимации термодинамических веществ. Однако, чтобы достичь уровня известного пакета CHEMKIN, требуется существенно улучшить его информационную среду: создать более дружелюбный для пользователя интерфейс, внедрить больший объем диагностической информации, создать электронный учебник и т.д. В этом смысле очень полезной разработкой, как в методическом, так и в

прикладном аспектах, является справочник [56] и сопутствующее ему программное обеспечение.

В настоящей работе излагаются также созданные на базе реакторного подхода модели реагирующих течений типа: “газ + жидкость” и ”газ + уголь”, по которым были разработаны инвариантные программы расчета, применяющиеся в научных исследованиях и в проектных работах.

Дано также краткое описание пакета программ для расчета процессов в соплах, который был скомпонован из моделей и программ, созданных авторами работ [16, 38, 39], программы, реализованной по модели [42] и собственной программы расчета химически-неравновесных процессов [57]. Пакет был ориентирован на ЭВМ типа ЕС и широко применялся в работе предприятий машиностроения. В настоящее время этот пакет адаптирован для ПК и стал более удобным в работе.

Библиография

1. Oran E.S. and Boris J.P., Numerical Simulation of Reactive Flow. Ed. Elsevier, New York, 1987.
2. Eaton A.M., Smooth L.D., Hill S.C. and Eatough C.N., Components, Formulations, Solutions, Evaluation and Application of Comprehensive Combustion Models. //Progress in Energy and Combustion Science 25, 1999, pp.387-436.
3. Jiang T.L. and Chiu Huei-Huang, Bipropellant Combustion in a Liquid Rocket Combustion Chamber. //Journal of Propulsion and Power, Vol. 8, No 5, 1992, pp. 995-1003.
4. Nieckele A.O., Naccache M.F. Gomes M.S.P., Carneiro, J.E and Serfaty R., Evaluation of Models for Combustion Processes in a Cylindrical Furnace. //ASME-IMECE, International Conference of Mechanical Engineering, New York, 2001.
5. Blom J.G. and Verwer J.G., A Comparison of Integration Methods for Atmospheric Transport-Chemistry Problems. //Journal of computational and Applied Mathematics, No 126, 2000, pp. 381-396.
6. Хохлов А.В., Цымбал А.Н., Гидаспов В.Ю., Стрельцов В.Ю., Численное моделирование горения в камерах кислородно-водородного ЖРД с учетом сопряженного теплообмена. //Тезисы V международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ-2004), Самара, Россия, 2004, стр. 196-197.
7. Kee R.J., Rupley F.M., Meeks E. & Miller J.A., CHEMKIN: A Software package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics. Sandia National Laboratories Report SAND96-8216, CA, 2000.
8. Jones W.P. and Lindstedt R.P., Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion. //Combustion and Flame, Vol. 73, No 1,3, 1988, pp.233-242.
9. Lindstedt R.P. and Maurice, L.Q., Detailed Chemical –Kinetic Model for Aviation Fuels. //Journal of Propulsion and Power, Vol. 16, No 2, 2000, pp. 187-195.
10. Foelsche R.O., Keen J.M., Solomon W.C., Buckley P.L. and Corporan E., Nonequilibrium Combustion Model for Fuel-Rich Gas Generators. //Journal of Propulsion and Power, Vol. 10, No 4, 1994, pp. 461-472.
11. Абрамович Г.Н., Теория Турбулентных Струй. М., Физматгиз, 1960, 716р.
12. Глебов Г.А., Теплообмен в турбулентном пограничном слое сжимаемого газа с градиентом давления. //в Сб. “Тепломассообмен-VI”, т.1, ч.2, Институт Тепломассообмена, Минск, 1980.
13. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г., Курс химической кинетики. Москва, Изд. Высшая школа, 1969, 432 стр.
14. Крюков В.Г., Наумов В.И., Демин А.В., Абдуллин А.Л., Тринос Т.В., Горение и течение в агрегатах энергоустановок. Москва, Янус-К, 1997, 304 стр.
15. Франк-Каменецкий Д.А., Диффузия и теплопередача в химической кинетике. Москва, Наука, 1988, 502 стр.

16. Алемасов В.Е., Дрегалин А.Ф., Тишин А.П., Худяков В.И., Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Справочник Том 1, Москва, ВИНТИ, 1971, 266 стр.
17. Gordon S., McBride B.J., NASA SP-273 Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks and Chapman-Jouguet Detonations. Washington, 1971, 245p.
18. Алемасов В.Е., Дрегалин А.Ф., Тишин А.П., Худяков В.И., Костин В.Н., Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Справочник Том 3, Москва, ВИНТИ, 1973, 623 стр.
19. Burcat A., Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion. Technion Aerospace Engineering (TAE) Report # 867 January, Faculty of Aerospace Eng. Technion – Israel Institute of Technology, 2001.
20. Камзолов В.И., Пирумов У.Г., Расчет неравновесных течений в соплах. //Изв. АН СССР, Механика жидкости и газа, 1966, No 6, стр. 25-33.
21. Press, W. H.; Flinnery, B. P. and Vetterling, W. T., et al. Numerical Recipes in C: The art of scientific equation models by polynomial approximation. New Jersey: Prentice-Hall, 1988, 735p.
22. Крюков В.Г., Исхакова Р.Л., Заболоцкая И.А.П., Расчет эмиссии вредных веществ, используя детальные механизмы реакций. //Труды I – го Международного Конгресса MERCOFRIO-98, Порту-Алегро, Бразилия, 1998, 6 стр. (на португальском языке).
23. LEEDS Reaction Kinetics Database. School of Chemistry, University of Leeds, 2000.
24. Белов Г.В., Иориш В.С., Юнгман В.С., Моделирование равновесных состояний термодинамических систем с использованием IVTANTERMO для Windows. //Теплофизика высоких температур, т. 28, No 2, 2000, стр. 191-196.
25. Мошкин Е.К., Нестационарные режимы работы ЖРД. М., Машиностроение, 1997, 336 стр.
26. Priem P.J., Heidmann M.F., Propellant vaporization as a design criterion for rocket-engine combustion chambers. NASA Technical Report, R-67, 1960.
27. Rosner D.E. and Chang W.S., Transient Evaporation and Combustion of a Fuel Droplet Near its Critical Temperature. //Combustion Science and Technology, Vol.7, 1973, pp. 145-158.
28. Основы практической теории горения. Под ред. Померанцева В.В, Ленинград, Энергоатомиздат, 1986, 312 стр.
29. Sirignano W.A., Delplanque J.P., Transcritical Vaporization of Liquid Fuels and Propellants. //Journal of Propulsion and Power, Vol. 15, No 6, 1999, pp.896-902.
30. Daou J., Haldenwang P., Nicoli C., Supercritical Burning of Liquid Oxygen Droplet with Detailed Chemistry. //Combustion and Flame, Vol. 101, No 1-2, 1995, pp.153-169.
31. Дрегалин А.Ф., Зенуков И.А., Крюков В.Г., Наумов В.И., Математическое моделирование высокотемпературных процессов в энергоустановках. Казань, КГУ, 1985, 264 стр.
32. Варгафтик И.Б., Справочник по Теплофизическим Свойствам Газов и Жидкостей. Москва, Гос. Изд-во Физ-Мат. Литературы, 1963, 708 стр.
33. Кондратьев В.Н., Константы Скорости Газофазных Реакций. Справочник, М., Наука, 1974, 512 стр.
34. Аравин Г.С., Власов П.А., Карасевич Ю.К. и др., Исследование механизма химической ионизации при высокотемпературном окислении метана в ударных волнах. //Физика горения и взрыва, No 1, 1982, стр. 49-57.
35. Calcote H.F., Mechanisms of Soot Nucleation in Flames. Combustion and Flame, No 42, 1981, pp. 31-37.
36. Бакиров Ф.Г., Захаров В.М., Полещук И.З., Шайхутдинов З.Г., Образование и выгорание сажи при сжигании углеводородных топлив. М., Изд. Машиностроение, 1989, 128стр.
37. Пирумов У.Г., Росляков Г.С., Газовая динамика сопел. Москва, Наука, Гл. Изд. Физ-Мат. Литературы, 1990, 368 стр.
38. Тишин А.П., Волков В.А., Гурова Л.П., Расчет параметров двухфазного течения в соплах

- Лавалья. Программа ОФАП, рег. No 700, 1979.
39. Рычков А.Д., Численные исследования двухфазных течений в осесимметричных соплах Лавалья с учетом коагуляции и дробления. //Изв. АН СССР, МЖГ, No 1, 1980, стр. 82-90.
 40. Рычков А.Д., Математическое моделирование газодинамических процессов в соплах. Наука, Новосибирск, 1988.
 41. McCormack R.W., Baldwin B.S., A Numerical Method for Solving the Navier-Stokes Equations with Application to Shock-Boundary Layer Interactions. AIAA Paper, 75-1, Pasadena, California, 1975.
 42. Авдудевский В.С., Метод расчета пространственного турбулентного пограничного слоя в сжимаемом газе. Изд. АН СССР, Механика и Машиностроение, No 4, 1962, стр. 3-12.
 43. Flynn J. P., Lane G.A. & Plomer G.G., Plasticized nitrocellulose propellant composition containing aluminum hydride and nitronium perchlorate. Adamas Carbide Corp. 1965.
 44. Nack H., Litt R.D., Kim B.C., Tumolo R., Coffering Coal with Waste Material. //Coal Combustion Congresses, Peking, China, 1988, pp. 452-459.
 45. Tang B., Ohtake K., Computer Simulation and NO Formation in Pulverized-Coal Combustion. //Proceedings of Coal Combust. Science and Technology of Industrial and Utility Applications, Ed. Hemisphere Publishing Corporation, 1988, pp. 199-206.
 46. Hayhurst A.N., Lawrence A.D., The Amounts of NO_x and N₂O Formed in a Fluidized Bed Combustor during the Burning of Coal Volatile and also of Char. //Combustion and Flame, 105, 1996, pp. 341-357.
 47. Knöbig T., Werther J., Amand L.E., Leckner B., Comparison of Large and Small Scale Circulating Fluidized Bed Combustors with Respect to Pollutant Formation and Reduction for Different Fuels. //Fuel, Vol. 77, No 14, 1998, pp. 1635-1642.
 48. Kobayashi H., Howard J.B., Sarofim A.F., Coal Devolatilization at High Temperatures. //Proceedings of 17 th Inter. Symp. on Combustion, The Combustion Institute, 1976, pp. 411-425.
 49. Monson R.C., Germane G. J., Blackham A. U., Smoot, L. D., Char Oxidation at Elevated Pressures. //Combustion and Flame, No 100, 1995, pp. 669-683.
 50. Veras C.A.G., Carvalho Jr.J.A., Saastamoinen J.J., Effect on Pressure on Single Particle Combustion Rate. //Proceedings of 6-th Brazilian Congress of Engineering and Thermal Sciences, Florianopolos -SC, Brazil, 1996, pp. 225-230.
 51. Costa V.J., Krioukov V.G, Maliska C.R., Pulverized Coal Combustion and Its Interaction with Moisture. //Proceedings of NHTC-35th National Heat Transfer Conference, June 10 – 12, California, 2001, 8p.
 52. Costa V.J., Mathematical Model for Pulverized Coal Combustion. Thesis of Ph.D., University of Santa Catarina, Brazil, 2002, 191p.
 53. Jost M E., Leslie I., Kruger C., Reactivity of Pulverized Coal in an Oxidizing Environment. //20 Symposium International on Combustion, The Combustion Institute, 1984, pp. 1531-1537.
 54. Visona S.P., Stanmore B.R., Modeling NO_x Release from a Single Coal Particle I. Formation of NO from Volatile Nitrogen. //Combustion and Flame, 105, 1996, pp. 92-103.
 55. Westbrook C.K., Dryer F.L., Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion. //Progress Energy Combustion Sci, Vol. 10, No 10, 1984, pp. 1-57.
 56. Физико-химические процессы в газовой динамике. Компьютиризованный справочник в 3-х томах, т. 1: Динамика физико-химических процессов в газе и плазме. Под ред. Черного Г.Г., Лосева С.А., Москва, Изд. МГУ, 1995, 350 стр.
 57. Крюков В.Г., Тринос Т.В., Численные исследования химически-неравновесных течений в сверхзвуковых соплах. //Труды XIV Конгресса инженеров-механиков, Сан Пауло, Бразилия, 1997, 10 стр. (на португальском языке).