

**Влияние модели кинетики на развитие реакции горения и ее тепловой эффект***Ноздрачев А.Ю.<sup>1</sup>*<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

При расчете реагирующего течения в камере сгорания ЛА химическое равновесие возникает, как предел нестационарного процесса развития реагирующей системы. В этом пределе обращаются в нуль источниковые члены в уравнениях для каждой компоненты реагирующей смеси. В работе [1] показано, что это не обеспечивает истинное химическое равновесие, при котором обращаются в нуль скорости всех химических реакций. При использовании моделей химической кинетики можно получить нефизичное стационарное состояние, которое не является подлинным равновесием. Это связано с тем, что моделях кинетики есть зависимые реакции, уравнения которых являются линейной комбинацией уравнений других реакций. Для получения истинного равновесия в [1] предложено модифицировать скорости зависимых реакций так, чтобы константы их равновесия выражались через константы равновесия независимых реакций.

В настоящей работе рассматривается горение водорода в воздухе. Используется модель кинетики, описанная в [2]. В эту модель входят 10 химических компонент смеси и 11 реакций, из которых 5 независимых. Сравниваются результаты использования исходного варианта модели и варианта, модифицированного в соответствии с рекомендациями [1].

Численно решаются две простые задачи: локальное горение смеси водорода с воздухом в постоянном объеме и горение такой же смеси в канале постоянной ширины при невязком течении газа (модель камеры сгорания ПВРД в приближении, что водород мгновенно и однородно по сечению канала перемешивается с воздухом).

В первой задаче рассматривалась однородная по объему смесь водорода и воздуха с начальным давлением  $p = 135742$  Па,  $T = 1160$  К. Коэффициент избытка окислителя варьировался в диапазоне  $\alpha = 0.1...2$ . Решалась система, включающая условие постоянства внутренней энергии единицы массы смеси (включающей химическую энергию):  $\sum Y_i e_i = const$  и 9 уравнений химической кинетики:  $\rho dY_i/dt = -m_i S_i$ , где  $\rho = const$  - плотность смеси,  $Y_i$  - массовая доля  $i$ -й компоненты смеси,  $m_i$  - ее молекулярный вес, а  $S_i$  - источниковый член, содержащий вклады от скоростей различных химических реакций.

Во второй задаче рассматривался канал площадью  $F = 1$  м<sup>2</sup>. В канал втекает поток воздуха с параметрами  $p_{air} = 132234$  Па,  $T_{air} = 1175$  К и  $u_{air} = 144.5$  м/сек. Предполагается, что в начальном сечении к этому потоку мгновенно и равномерно по каналу подмешивается водород с параметрами  $T_{H_2} = 1000$  К,  $p_{H_2} = 535282$  Па и  $u_{H_2} = 2412$  м/сек. Коэффициент избытка окислителя (по расходу) также варьировался в диапазоне  $\alpha = 0.1...2$ . Решались следующие уравнения:  $\rho u = const$ ,  $\rho u^2 + p = const$ ,  $u^2/2 + \sum Y_i h_i = const$  ( $h$  - энтальпия) и  $\rho u dY_i/dx = -m_i S_i$ .

На рис.1 представлены графики изменения температуры, полученные в расчетах для  $\alpha = 1$  с использованием исходной и модифицированной кинетических схем. Обе схемы дают практически одинаковые длительности задержки воспламенения. Длительности этапа быстрого роста температуры также близки, но поведение температуры на этом этапе отличается. Переход к стационарному состоянию при использовании модифицированной кинетики происходит гораздо дольше, при этом температура в стационарном состоянии получается гораздо большей.

На рис.2 сравниваются полученные в расчетах зависимости теплового эффекта химической реакции  $Q$  от  $\alpha$ . Тепловой эффект рассчитывался на единицу массы смеси по формуле  $Q = \sum \int h_k dY_k = \int C_p dT - \int dh$ . Для сравнения приводится теоретическая

зависимость  $Q_{\max}(\alpha) = H_u \min(1; \alpha) / (1 + 34.56\alpha)$ , которая получается по брутто-реакции  $2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$  в пренебрежении обратными реакциями. Теплотворная способность топлива  $H_u$  взята при температуре 3000 К. Исходная кинетика сильно смещает максимум кривой  $Q(\alpha)$  в сторону малых значений  $\alpha$ , а модифицированная кинетика дает лишь небольшое смещение по сравнению с теорией. Исходная кинетика также сильно занижает тепловой эффект реакции.

Таким образом, использование кинетических схем без модификаций, описанных в [1], дает результаты, сильно расходящиеся с теоретическими предсказаниями.

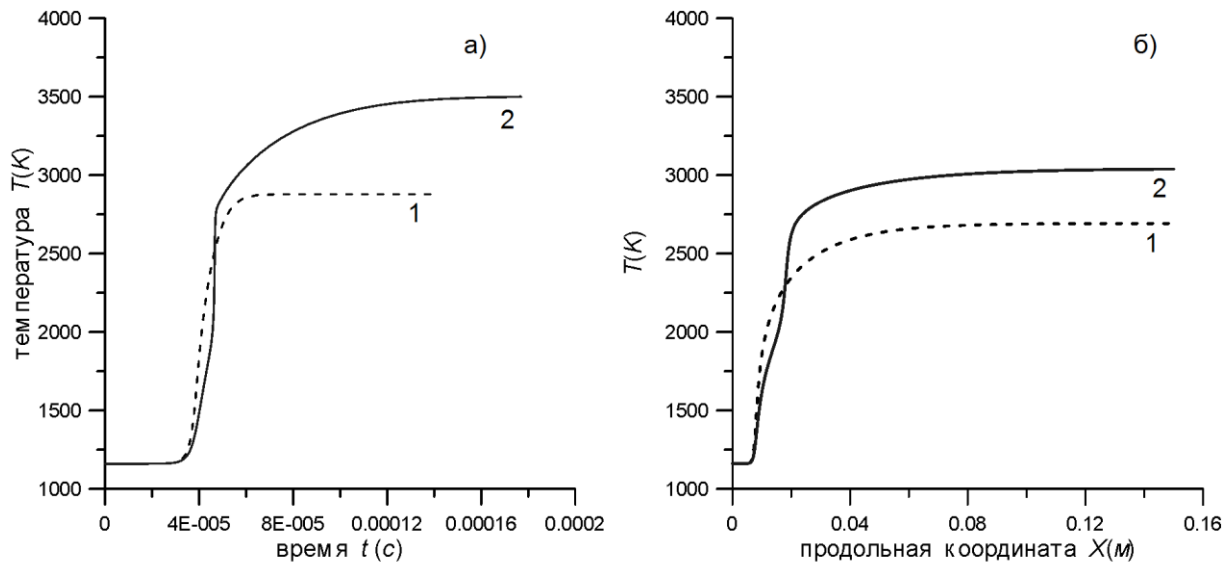


Рис. 1. Изменение температуры в ходе реакции в первой (а) и во второй (б) задачах при  $\alpha = 1$ . 1 - исходная кинетика, 2 - модифицированная кинетика

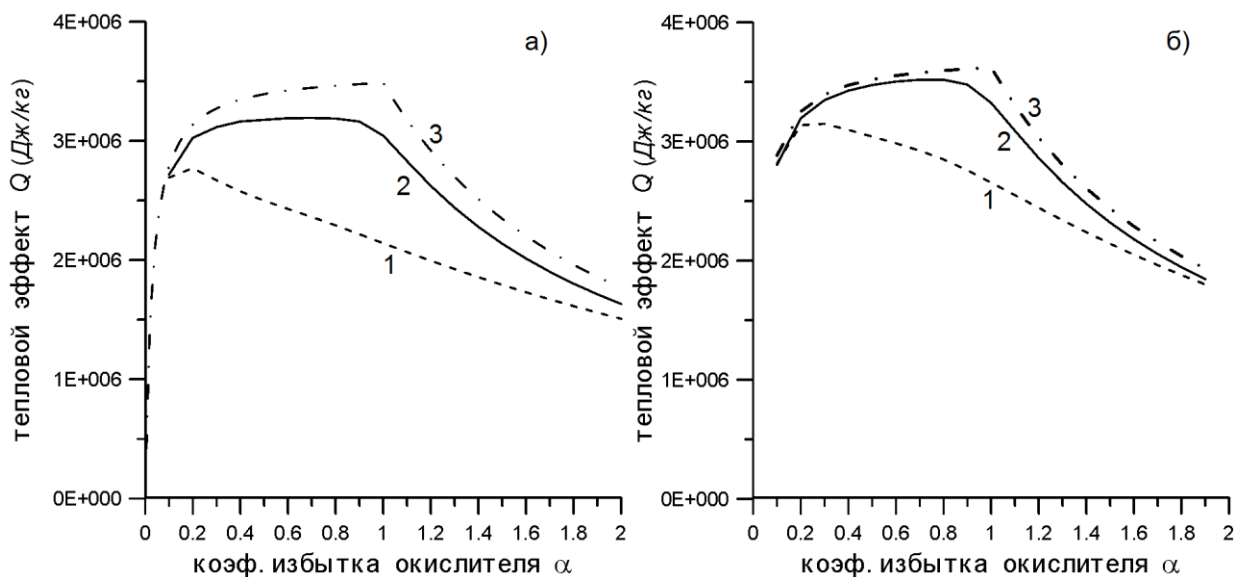


Рис. 2. Зависимости теплового эффекта от коэффициента избытка окислителя в первой (а) и во второй (б) задачах. 1 - исходная кинетика, 2 - модифицированная кинетика, 3 - теоретическая зависимость

### Литература

1. *Ширяева А.А.* О стационарном состоянии в потоке реагирующей смеси газов // *Химическая физика*. 2010. Т. 29. № 6. С. 21-30.
2. *Власенко В.В., Ширяева А.А.* Расчеты течения в модельной высокоскоростной камере сгорания с использованием различных моделей химической кинетики. *Горение и взрыв*. 2015. Т. 8. № 1. С. 116-125.