

УДК 621.454

## СОКРАЩЕНИЕ МЕХАНИЗМОВ РЕАКЦИЙ ПРИ РАСЧЕТЕ ХИМИЧЕСКИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ТЕЧЕНИЙ В СОПЛАХ

© Сыромятников А.Д., Крюков В.Г.

e-mail: RU4PAB@yandex.ru

*Казанский национальный исследовательский технический университет имени А.Н. Туполева – КАИ, г.Казань, Республика Татарстан, Российская Федерация*

Для расчета химически неравновесных течений в соплах обычно используется формальная химическая кинетика [1,2]. Для этого некоторый реакционный механизм, включается, например, в обратную задачу сопла Лавалея [2]. Этот механизм обычно является мало обоснованным. Он может быть избыточным (что приводит к ненужному увеличению объема вычислений), или чрезмерно упрощенным (что вызывает значительные ошибки в прогнозировании характеристик течения). Но в связи с развитием методов сокращения, проблему его обоснования можно решить следующим образом:

- формируется исходный (избыточный) механизм, включаемый в модель расчета;
- выбирается какой-либо метод сокращения реакционного механизма или комбинация методов;
- выполняются расчеты по модели неравновесного течения, на основе которых проводится сокращение механизма до обеспечения контролируемой погрешности в прогнозировании характеристик течения.

Современные процедуры сокращения используют следующие положения:

- изначально устанавливается область параметров, охватываемая искомым сокращенным механизмом;
- механизм, сокращенный для одной точки параметров, называется локальным (*L*-механизм), а для области изменения параметров – глобальным (*G*-механизм); обычно он формируется в ходе объединения *L*-механизмов.
- задается набор целевых веществ, которые в ходе сокращения не могут удаляться, из механизма в отличие от остальных (зондируемых) веществ.
- для каждого применяемого метода задается показатель сокращения (порог).

В работе [3] была предложена процедура сокращения, которая состоит из двух методов: DRGEP (Directed Relation Graph Error Propagation) и зацепления. Метод DRGEP [4] ориентирован на поиск и удаление из сокращаемого реакционного механизма только веществ вместе с включающими их реакциями. Но после применения этого метода в механизме могут оставаться еще ряд малозначимых реакций. Такие реакции удаляются методом зацепления [5].

Для проверки предложенной процедуры были выполнены расчеты по сокращению механизмов реакций для течений продуктов сгорания топлива «Керосин + O<sub>2</sub>» в области изменения параметров:

$$\alpha_{ок} = 0.7 \dots 1.2; P_{oc} = 20 \dots 100 \text{ атм.}; r_m = 0.006 \dots 0.06 \text{ м}, \quad (1)$$

(где  $\alpha_{ок}$  – коэффициент избытка окислителя;  $P_{oc}$  – давление на входе в сопло;  $r_m$  – радиус минимального сечения), и сокращенный *G*-механизм будет охватывать указанную область. С изменением размеров сопла форма его контура не меняется, а геометрическая степень расширения задается постоянной  $f_a = (r_a/r_m)^2 = 50$  ( $r_a$  –

радиус среза сопла). Сформированный нами исходный механизм включал 16 веществ и 47 реакций [6]. Целевыми веществами считаются:  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ .

Сначала выполнялся расчет базового режима течения с параметрами  $\alpha_{ок} = 1.0$ ;  $P_{ос} = 20$  атм.;  $r_m = 0.006$  м, когда явно проявляются химически неравновесные эффекты, и по нему были установлены значения порогов  $\zeta_d = 0.02$  (DRGEP- метод),  $\zeta_{az} = 0.02$  (метод зацепления) для всего  $G$ - механизма. Далее в области (1) было выбрано около 40 точек  $\{\alpha_{ок}; P_{ос}; r_m\}$ , и для каждой точки был сгенерирован  $L$  – механизм. Объединяя эти механизмы, был сформирован  $G$ - механизм, включающий вещества ( $\text{H}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{HCO}$ ) и 15 реакций.

Полученный результат для одномерных задач не имеет особого значения, т.к. такие задачи на персональных компьютерах решаются за несколько секунд. Но расчет многомерных реагирующих течений может занимать много часов и тогда применение созданного  $G$  – механизма позволит существенно сократить время вычислений при приемлемой ошибке в прогнозе характеристик течения.

### Библиографический список

1. Гидаспов В. Ю. «Численное моделирование химически неравновесного течения в сопле ЖРД», *Вестник МАИ* Т. 20. № 2, 2013, стр. 90-97
2. Пирумов У. Г., Росляков Г. С. Газовая динамика сопел. – М.: Наука, гл. изд. физ.-мат. литературы, 1990. – 368 с.
3. Крюков В.Г., Абдуллин А.Л., Никандрова М.В., Сафиуллин И.И. «Применение методов DRGEP и зацепления для сокращения механизмов реакций при расчете химически неравновесных течений в соплах двигателей летательных аппаратов», *Известия ВУЗов. Авиационная техника*, № 4, 2018, стр 154-157
4. Pepiot-Desjardins P., Pitsch H. “An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms”, *Combustion and Flame*, 2008, Vol. 154, pp. 67-81.
5. Никандрова М.В., Крюков В.Г., Исхакова Р.Л. «Сокращение механизма реакций методом зацепления», *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. Институт Механики, МГУ, 2007, т.5, Стат. 15.
6. Glarborg P., Miller J.A., Kee R.J. “Kinetic Modeling and Sensitivity Analysis of Nitrogen Oxide Formation in Well-Stirred Reactors”, *Combustion and Flame*, 65, pp.177-202, 1986.