

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ОКСИДА АЗОТА В КАМЕРАХ СГОРАНИЯ АВИАЦИОННЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УСТАНОВОК

Куценко Ю.Г.

ОАО «Авиадвигатель», г. Пермь

1. ВВЕДЕНИЕ

Проектирование и доводка камер сгорания газотурбинных двигателей (ГТД) – сложный процесс, который включает в себя большой объем конструкторской и экспериментальной работы. Применение методов вычислительной газовой динамики позволяет снизить объем экспериментальных работ по доводке камер сгорания и внести изменения в конструкцию камер сгорания на ранних стадиях проектирования. Несмотря на наличие коммерческих (доступных на рынке) пакетов программ вычислительной газовой динамики, успешное применение их в практике проектирования малоэмиссионных камер требует решения целого ряда проблем, обусловленных существенной нелинейностью и связанностью газодинамических и химических процессов (горения), то есть разработки специальной технологии моделирования. Разработка технологии математического моделирования процессов в камере сгорания включает в себя большой объем работ по настройке математических моделей турбулентности, горения, радиационного теплообмена. В данной работе рассматривается практическое применение технологии математического моделирования к расчету уровня эмиссии оксида азота в камере сгорания ГТД.

2. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

Для проведения расчетов камер сгорания были использованы следующие математические модели:

1. Для моделирования турбулентного течения производилось решение уравнений Навье-Стокса. использовалась $k-\varepsilon$ RNG модель турбулентности. Выбранная для решения задачи система уравнений имеет вид:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}); \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h} + \bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{h}'' - k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \tilde{\tau}_{ij} + \tilde{u}_i'' \tilde{\tau}_{ij}); \quad (3)$$

$$p = \sum_{k=1}^K [X_k] RT. \quad (4)$$

Здесь p – давление, ρ – плотность, T – температура, h – энтальпия, u_i – компоненты скорости, $[X_k]$ – молярная концентрация компонента смеси, R – универсальная газовая постоянная.

В моделях, применяемых для расчета турбулентных течений, гипотеза турбулентной вязкости Буссинеска связывает тензор Рейнольдсовых напряжений с градиентами осредненного поля скорости [1]:

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = \bar{\rho} \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} \mu_t \nabla \tilde{V} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{\rho} k \quad (5)$$

Коэффициент пропорциональности

$$\mu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (6)$$

есть турбулентная вязкость.

Уравнения переноса для кинетической энергии турбулентности k и скорости ее диссипации ε записываются в следующем виде:

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) - P_k - \bar{\rho} \varepsilon, \quad (7)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} u_j \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} \hat{P} - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \varepsilon) + \rho R, \quad (8)$$

где источниковый член рассчитывается по формуле:

$$P_k = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}, \quad (9)$$

добавочный член для k - ε RNG модели турбулентности выражается в виде:

$$R = C_{\eta} \frac{\eta^3 \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0} \right) \varepsilon^2}{(1 + \beta \eta^3) k}, \quad (10)$$

Для моделирования процессов турбулентного смешения и горения использовалась модель тонкого фронта пламени (Flamelet). При расчете камер сгорания авиационных ГТД совместно с моделью горения использовалась модель распространения и испарения капель керосина в лагранжевой постановке. Flamelet модель горения описывает взаимодействие процессов химической кинетики и турбулентного смешения в пределе быстрых реакций – при большом значении числа Дамкёлера (Число Дамкёлера $Da = t_f / t_c$ – отношение временных масштабов течения и химических реакций). Горение происходит в слое, называемом тонким фронтом пламени. Если скорость химических реакций достаточно высока, чтобы достигнуть завершения (или равновесия) как только реагенты смешаны, то термохимическое состояние полученной смеси может быть определено с использованием консервативной переменной – массовой доли восстановленного топлива.

Уравнения для массовой доли восстановленного топлива \tilde{Z} и ее вариации, применяемые в рамках Flamelet модели горения, имеют вид:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Z})}{\partial t} + \nabla(\bar{\rho}v\tilde{Z}) - \nabla(\bar{\rho}D\nabla\tilde{Z}) = 0, \quad (11)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Z}^{n2})}{\partial t} + \nabla(\bar{\rho}v\tilde{Z}^{n2}) - \nabla(\bar{\rho}D\nabla\tilde{Z}^{n2}) = C_\chi \frac{\mu_t}{Sc_t} (\nabla\tilde{Z})^2 - \bar{\rho}\tilde{\chi}. \quad (12)$$

Неравновесные эффекты – влияние внешнего поля течения на зону горения описываются выражением для скорости диссипации массовой доли восстановленного топлива:

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{k}{\varepsilon} \tilde{Z}^{n2} \quad (13)$$

Значениям \tilde{Z} , \tilde{Z}^{n2} , $\tilde{\chi}$ соответствуют определенные значения массовых долей топлива, окислителя и продуктов сгорания, полученные путем генерации *Flamelet* библиотеки с использованием кинетических механизмов, описывающих процесс горения топлива.

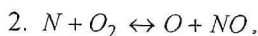
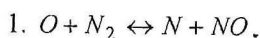
2. Для расчета пространственного распределения концентрации оксида азота в камере сгорания решалось уравнение переноса для массовой доли *NO*:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_{NO})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_j\tilde{Y}_{NO})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial\tilde{Y}_{NO}}{\partial x_j} \right) + R_{NO}, \quad (14)$$

где источникный член R_{NO} – скорость образования *NO*.

В камерах сгорания ГТД к образованию *NO* приводят два различных химических процесса: механизмы «термических» (Зельдовича) и «быстрых» *NO*.

Механизм Зельдовича – основной источник оксида азота при протекании процесса горения с температурой выше 1800 К. *NO* формируется вследствие комбинации атомов *O* и *N*, которые образуются при высоких температурах. Основные реакции, приводящие к образованию «термических» *NO* из молекулярного азота приведены ниже:



При условиях близких к стехиометрическим и в богатых топливно-воздушных смесях определенный вклад вносит реакция:



Скорости для данных реакций известны из экспериментальных данных и определяются по формулам:

$$k_1 = 1,8 \times 10^8 e^{-38370/T}; \quad (15)$$

$$k_{-1} = 3,8 \times 10^7 e^{-425/T}; \quad (16)$$

$$k_2 = 1,8 \times 10^4 T e^{-4680/T}; \quad (17)$$

$$k_{-2} = 3,8 \times 10^3 T e^{-20820/T}; \quad (18)$$

$$k_3 = 7,1 \times 10^7 e^{-450/T}; \quad (19)$$

$$k_{-3} = 1,7 \times 10^8 e^{-24560/T} \quad (20)$$

Здесь k_1, k_2, k_3 константы скоростей прямых реакций и k_{-1}, k_{-2}, k_{-3} соответствующие им скорости обратных реакций. Суммарная скорость образования NO определяется по формуле:

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_1[O][N_2] + k_2[N][O_2] + k_3[N][OH] - k_{-1}[NO][N] - k_{-2}[NO][O] - k_{-3}[NO][H]. \quad (21)$$

Расчет уровня эмиссии оксида азота в камерах сгорания ГТД обычно производится с использованием некоторых допущений. Одним из таких допущений является предположение о квазиравновесном состоянии для расчета концентрации N . Скорость реакции образования оксида азота значительна только на высоких температурах, так как для образования N требуется разрыв сильной тройной связи молекулы N_2 (энергия диссоциации 941 кДж / гмоль). Это физическое явление представлено большой величиной энергии активации реакции 1 (15), которая лимитирует скорость образования NO в рамках механизма Зельдовича. С

другой стороны, энергия активации для окисления N в результате реакции 2 невелика (17). Когда имеется достаточно кислорода, например, в бедной смеси, скорость потребления атомов свободного азота становится равной скорости его образования, следовательно, имеет место квазиравновесное состояние. Таким образом, выражение для скорости образования NO принимает вид:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_1[O][N_2] \frac{\left(1 - \frac{k_{-1}k_{-2}[NO]^2}{k_1[N_2]k_2[O_2]}\right)}{\left(1 + \frac{k_{-1}[NO]}{k_2[O_2]k_3[OH]}\right)}. \quad (22)$$

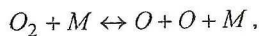
Для расчета концентрации атомарного кислорода O может быть использован один из трех методов:

1. Допущение о равновесности реакции диссоциации-рекомбинации O .

Скорость реакции образования NO намного медленнее, чем скорость окисления углеводородных соединений, как следствие этого, основная масса термических NO образуется после завершения процесса окисления углеводородных соединений. Следовательно, процесс образования термических NO может быть отделен от механизма основных реакций процесса горения. Скорость образования NO может быть определена, исходя из предположения о равновесности химических реакций. С использованием данного предположения вычисление скорости образования «термических» NO значительно упрощается. Величина равновесной концентрации атома свободного кислорода может быть получена из выражения [2]:

$$[O] = 3,97 \times 10^5 T^{-1,2} [O_2]^{1/2} e^{-31090/T}. \quad (23)$$

2. Предположение о частичном равновесии реакции диссоциации-рекомбинации O . Упомянутый выше метод расчета концентрации O может быть усовершенствован путем расчета реакций с участием третьего тела в процессе диссоциации-рекомбинации O_2 :



Уравнение (23) в этом случае заменяется следующим выражением [3]:

$$[O] = 36,64T^{1/2} [O_2]^{1/2} e^{-27123/T}. \quad (24)$$

3. Концентрация атомарного кислорода может быть предсказана с использованием моделей горения, таких как модель тонкого фронта пламени (*Flamelet*).

Для расчета концентрации радикала *OH* также могут быть использованы три метода:

1. Пренебрежение концентрацией *OH*. В рамках этого допущения третья реакция в механизме Зельдовича предполагается малозначительной при выполнении следующих условий:

$$k_2 [O_2]_{\text{равновесная}} \gg k_3 [OH]_{\text{равновесная}} \quad (25)$$

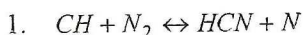
это предположение справедливо для бедных смесей и является допустимым предположением для большинства случаев.

2. Допущение о частичном равновесии реакции образования *OH*. С использованием этого приближения концентрация *OH* для механизма Зельдовича определяется по формуле:

$$[OH] = 2,129 \times 10^{-2} T^{-0,57} e^{-4595/T} [O]^{1/2} [H_2O]^{1/2} \quad (26)$$

3. Концентрация *OH* может быть предсказана с использованием моделей горения, таких как модель тонкого фронта пламени (*Flamelet*).

Присутствие второго механизма, приводящего к образованию *NO*, впервые было выявлено Фенимором. Этот механизм был назван «быстрым». «Быстрые» *NO* формируются в значительном количестве при низких температурах в богатой топливо-воздушной смеси. Процесс образования «быстрых» *NO* включает в себя множество реакций и промежуточных компонентов:



2. $N + O_2 \leftrightarrow NO + O$
3. $HCN + OH \leftrightarrow CN + H_2O$
4. $CN + O_2 \leftrightarrow NO + CO$
5. $CH_2 + O_2 \leftrightarrow NO + CO$

Предполагается, что основным источником «быстрых» NO в углеводородных пламенах являются компоненты, получившиеся путем распада топлива. Основной вклад вносят реакция 1 с участием CH и реакция 5 с участием CH_2 . Скорость образования «быстрых» NO пропорциональна числу атомов углерода, приходящихся на единицу объема, и не зависит от типа углеводорода, используемого топлива. Количество образующегося HCN возрастает при увеличении концентрации углеводородных радикалов, которая в свою очередь возрастает при уменьшении коэффициента избытка воздуха. Реакция 1 играет определяющую роль в образовании «быстрых» NO , проведенные исследования [4] показали, что основная часть «быстрых» NO образуется по реакции 1. Предполагая, что реакция 1 является лимитирующей для механизма образования «быстрых» NO , получаем:

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_o [CH][N_2]. \quad (27)$$

Однако имеется неопределенность, связанная с выражением для скорости данной реакции. Ознакомившись с реакциями 1-5 образования «быстрых» NO можно заключить, что расчет уровня эмиссии «быстрых» NO должен проводиться совместно с механизмом окисления углеводородных соединений. Кинетические механизмы окисления углеводородных топлив включают много шагов и чрезвычайно сложны для проведения расчета совместно с решением газодинамической задачи. Поэтому для определения уровня эмиссии «быстрых» NO обычно используется модель, предложенная Де Соетом [5]. Он показал, что общая скорость образования «быстрых» NO может быть определена из выражения:

$$\frac{d[NO]}{dt} = f k'_{pr} [O_2]^a [N_2] [FUEL] e^{-E_a/RT}, \quad (28)$$

где

$$f = 4,75 + 0,0819n - \frac{23,2}{\alpha} + \frac{32}{\alpha^2} - \frac{12,3}{\alpha^3}, \quad (29)$$

n – число атомов углерода в молекуле углеводородного топлива, α – коэффициент избытка топлива. Порядок реакции для кислорода зависит от условий протекания процесса горения и связан с молярной долей кислорода в пламени:

$$a = \begin{cases} 1,0; X_{O_2} < 4,1 \times 10^{-3} \\ -3,95 - 0,9 \ln X_{O_2}; 4,1 \times 10^{-3} \leq X_{O_2} \leq 1,11 \times 10^{-2} \\ -0,35 - 0,11 \ln X_{O_2}; 1,11 \times 10^{-2} < X_{O_2} < 0,03 \\ 0; X_{O_2} \geq 0,03 \end{cases} \quad (30)$$

Скорости реакции образования NO сильно зависит от температуры из-за большой величины энергии активации. Следовательно, флуктуации температуры могут сильно увеличить концентрацию оксида азота, образующегося в турбулентных пламенах. Для учета влияния турбулентных пульсаций на процесс образования оксида азота производилось решение уравнения для вариации температуры:

$$\frac{\partial(\rho T^{n_2})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j T^{n_2})}{\partial x_j} = \frac{\partial(\Gamma_j \nabla T^{n_2})}{\partial x_j} + C_{g1} \mu_l \left(\frac{dT}{dx} \right)^2 - C_{g2} \rho \frac{\varepsilon}{k} T^{n_2} + P_c. \quad (31)$$

Для определения осредненной скорости реакции образования NO – R_{NO} использовалась следующая формула:

$$R_{NO} = \frac{1}{T_u - T_l} \int_{T_l}^{T_u} R_k(T) P(T, T^{n_2}) dT, \quad (32)$$

где T_u и T_l верхний и нижний пределы интегрирования по температуре, P – β -функция плотности распределения вероятности.

3. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТОВ

Для анализа процесса образования NO были проведены газодинамические расчеты с учетом процесса горения камеры сгорания наземной ГТУ, созданной на базе авиационного двигателя ПС-90А. Для проведения расчетов использовалась геометрическая модель, включающая в себя сопло завихрителя, жаровую трубу и газосборник. Размер расчетной сетки составил около 1 млн. узлов. Расчеты проводились с использованием коммерческого газодинамического пакета *CFX-5.6*. В качестве граничных условий для проведения расчетов в основных отверстиях, на выходе из завихрителей и в щелях системы охлаждения задавались расходы воздуха, рассчитанные исходя из распределения эффективных площадей. На выходе из газосборника задавалось значение статического давления, рассчитанное исходя из величины потерь полного давления в камере сгорания 5,5 %. Расчеты были проведены для режимов, приведенных в таблице 1.

Таблица 1. Граничные условия для проведения расчетов

Режим	P_k , кгс/см ²	T_k , К	α	G , кг/с
1	8,07	553	4,96	1,81
2	14,82	655	3,27	2,91
3	20,07	720	2,51	3,63

При анализе результатов расчетов было выявлено, что доля «быстрых» NO , образующихся в камере сгорания ГТД незначительна и составляет от 0,1 до 0,2 % от общего выхода NO . Поэтому дальнейший анализ был проведен для результатов, полученных с использованием механизма Зельдовича.

Образование «термических» NO происходит вблизи поверхности стехиометрии – в зоне высоких температур при наличии достаточного количества атомарного кислорода (рис. 1). Вклад реакции 3 механизма Зельдовича – образования оксида азота с участием радикала OH невелик и составляет 6,56; 2,14; 4,44% от общего выхода NO для режимов 1,2,3 соответственно.

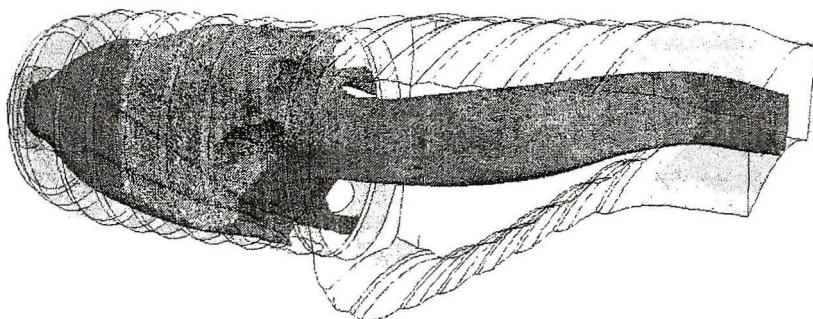


Рис. 1. Поверхность образования «термических» NO

Для расчета выхода NO с использованием реакций 1 и 2 механизма Зельдовича важно правильно определить концентрацию атомарного кислорода. На рис. 2 представлены результаты расчетов уровня эмиссии NO при использовании допущений о химическом равновесии атомарного кислорода, частичном равновесии реакции диссоциации-рекомбинации O_2 и с использованием концентрации, рассчитанной с использованием *Flamelet* модели.

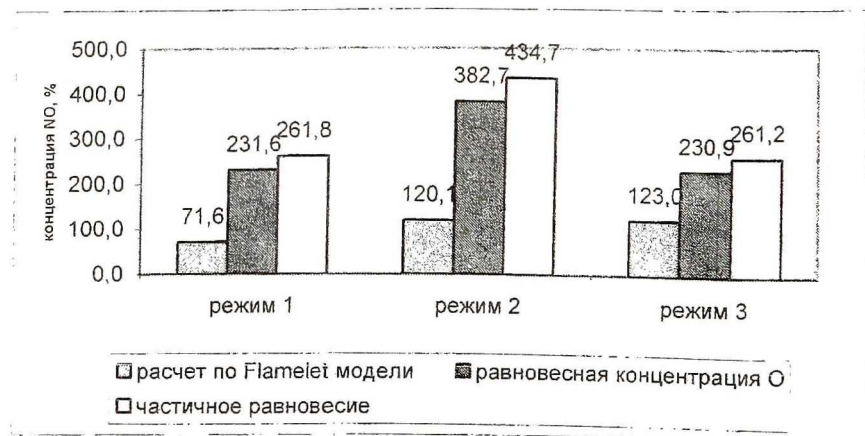


Рис. 2 Уровень эмиссии NO в процентах от экспериментальных данных

Значения уровня эмиссии NO представлены в процентном отношении к экспериментальным замерам концентрации NO (100%). Наиболее хорошее совпадение с экспериментальными данными наблюдается при использовании для расчета концентрации атомарного кислорода, полученной в рамках *Flamelet* модели горения – от 71,6% для режима 1 до 123% для режима 3. Расчет уровня эмиссии NO с использованием равновесной концентрации O и допущения о частичном равновесии реакции диссоциации-рекомбинации O_2 дает превышение экспериментального уровня в 2-4 раза.

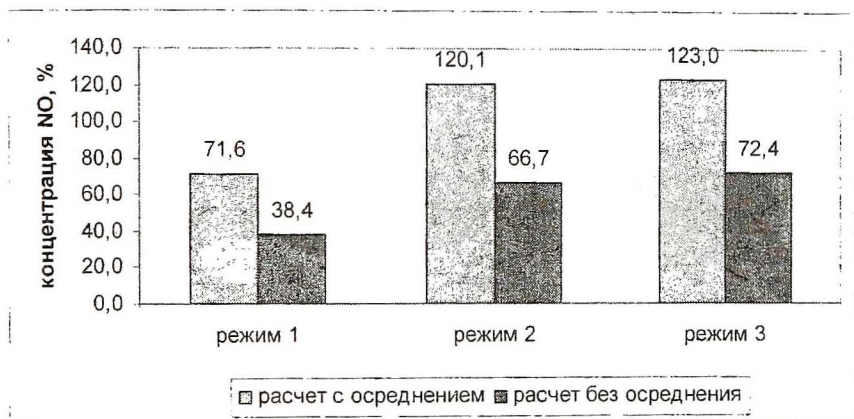


Рис. 3. Влияние осреднения скорости реакции на уровень эмиссии NO

Также необходимо отметить важность учета турбулентных пульсаций температуры при расчете скорости реакции образования NO . Расчет без осреднения скорости реакции по температуре с использованием β -функции плотности распределения вероятности приводит к получению почти в 2 раза заниженных концентраций оксида азота на выходе из камеры сгорания (рис. 3).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Брэдшоу П. Турбулентность. М.: Машиностроение. 1980.
2. Westenberg A.A. Comb. Sci. Tech. 4:59. 1971.
3. Warnatz J. NO_x Formation in High Temperature Processes. University of Stuttgart, Germany.

4. Combustion Research Facility News. / Schefer R.W., Namazian M., Kelly J. // vol. 3, 4. Sandia. 1991.
5. Smoot L.D., Smith P.J. NO_x Pollutant Formation in a Turbulent Coal System. Coal Combustion and Gasification. Plenum, NY. 1985. - P. 373.

УДК 621.438:536.38

ОПТИМИЗАЦИЯ КОНСТРУКЦИИ КАМЕРЫ СГОРАНИЯ ГАЗОТУРБИННОГО ДВИГАТЕЛЯ ДЛЯ СНИЖЕНИЯ ВЫБРОСОВ ОКСИДА АЗОТА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ

Куценко Ю.Г., Онегин С.Ф.

ОАО «Авиадвигатель», г. Пермь

1. ВВЕДЕНИЕ

Методы вычислительной газовой динамики (ВГД) находят все большее применение в авиационной промышленности для расчета камер сгорания [1]. Ранее применение этих методов для практического решения задач, связанных с процессом горения, было ограничено из-за больших затрат времени на генерацию расчетной сетки и получение решения. Экспериментальное тестирование систем двигателя, связанных с процессом горения могло завершиться быстрее, чем вычислительный эксперимент, включающий в себя построение расчетной сетки, запуск нескольких вариантов расчета и представление графиков основных параметров (потери полного давления, профиль температуры на выходе из газосборника, параметры эмиссии и т.д.). Недавние успехи в объединении в единую систему САД систем твердотельного моделирования с программами генерации расчетных сеток и развитие программ параллельного решения уравнений Навье-Стокса с использованием гибридных типов элементов позволили методам ВГД составить конкуренцию экспериментам.