

ва продуктов сгорания с  $z=5$  величина  $q_T$  должна получаться заведомо меньше, чем для состава с  $z=36$ . Т.е. двигатель как бы искусственно будет получаться более экономичным.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Термогазодинамический расчет газотурбинных силовых установок. / Д о р о ф е в В.М., Маслов В.Г., Первышин Н.В. и др. Куйбышевск. авиац. ин-т. им. С.П.Королева. –Куйбышев: КуАИ, 1973.-144с.
2. Ш м и д т Э. Введение в техническую термодинамику. –М.: Энергия, 1965.-392с.
3. Диденко А.А., Лукачев С.В. Упрощенная математическая модель кинетики окисления углеводородного топлива и образования окислов азота  $NO_x$ // Тез. Докл. IV Всеросс. науч.-техн. конф. «Процессы горения, теплообмена и экология тепловых двигателей». –Самара, 2002. –С.59-66.

УДК 621.431.75 + 662.6 + 536.46.1

### УПРОЩЕННАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КИНЕТИКИ ОКИСЛЕНИЯ ВОДОРОДА $H_2$ В АТМОСФЕРЕ ВОЗДУХА И ОБРАЗОВАНИЯ ОКИСЛОВ АЗОТА $NO_x$

Диденко А.А., Некрасова С.О.

*Самарский государственный аэрокосмический университет*

Для авиационных ГТД жидкий водород  $H_2$  давно рассматривается как одна из выгодных альтернатив существующим углеводородным топливам. Так с точки зрения экологических проблем при его использовании в продуктах сгорания отсутствуют многие токсичные составляющие, такие как окись углерода, несгоревшие углеводороды, сажа и др. Однако, сохраняется опасность появления повышенных концентраций окислов азота  $NO_x$  ( $NO$ ,  $NO_2$ ). Сложность задачи по снижению образования  $NO_x$  связана с тем, что различные составляющие этих окислов образуются как непосредственно в пламени, так и в послепламенных зонах. Математические модели процессов горения, которые используются при проектировании камер сгорания ГТД, с одной стороны, долж-

ны давать адекватные результаты и, соответственно, учитывать все необходимые физико-химические аспекты процессов горения. С другой стороны, они не должны быть очень сложными. Последнее особенно актуальным является для математических моделей химической кинетики горения топлив. Для задач эскизного проектирования камер сгорания достаточно удовлетворительных по адекватности и простоте химико-кинетических математических моделей процессов горения пока еще не создано.

Авторами данной работы разрабатывается термохимическая модель окисления водорода в атмосфере воздуха применительно для анализа рабочего процесса камер сгорания ГТД. В модели рассматривается участие 19 веществ — 16 молекулярных и 3 атомарных компонентов, это:  $O_2$ ,  $O_3$ ,  $H_2$ ,  $OH$ ,  $HO_2$ ,  $H_2O$ ,  $N_2$ ,  $NO$ ,  $NO_2$ ,  $N_2O$ ,  $NH$ ,  $NH_2$ ,  $NH_3$ ,  $HNO$ ,  $H_2O_2$ ,  $N_2H_4$  и соответственно,  $O$ ,  $H$ ,  $N$ , которые реагируют в 58 реакциях (см. таблицу). Данная модель, по сути, представляет собой модификацию уже апробированной модели авторов [1] по окислению углеводородного горючего  $C_nH_m$ , типа авиационного керосина, и образованию  $NO_x$ ; необходимые константы в формулах для скоростей химических реакций брались в основном из [3].

Таблица 1. Химические реакции окисления водорода и образования окислов азота

1	$O + H_2O = 2OH$	10	$H + NO = N + OH$
2	$2H + M = H_2 + M$	11	$OH + N_2 = N_2O + H$
3	$2O + M = O_2 + M$	12	$O_2 + N_2 = N_2O + O$
4	$OH + H + M = H_2O + M$	13	$NO + NO = N_2O + O$
5	$H + O_2 = OH + O$	14	$HO_2 + N_2 = N_2O + OH$
6	$O + H_2 = OH + H$	15	$M + O + N_2 = N_2O + M$
7	$H + H_2O = OH + H_2$	16	$HO_2 + NO = NO_2 + OH$
8	$O + N_2 = NO + N$	17	$O + NO_2 = NO + O_2$
9	$O + NO = N + O_2$	18	$2NO_2 = 2NO + O_2$

19	$O + HNO = NO + OH$	39	$NO + O_2 = O + NO_2$
20	$OH + HNO = NO + H_2O$	40	$N_2 + O_2 = 2NO$
21	$H_2 + O_2 = 2OH$	41	$2NO = N + NO_2$
22	$H_2O_2 + M = 2OH + M$	42	$NO + M = O + N + M$
23	$H_2O_2 + H = H_2O + OH$	43	$NO_2 + M = NO + O + M$
24	$H + NH_2 = NH + H_2$	44	$OH + NO_2 = NO + HO_2$
25	$H + NH_3 = NH_2 + H_2$	45	$NO_2 + H = NO + OH$
26	$NH + NO = N_2O + H$	46	$H + HO_2 = H_2O + O$
27	$NH_3 + OH = NH_2 + H_2O$	47	$H + HO_2 = H_2 + O_2$
28	$NH_3 + O = NH_2 + OH$	48	$2N + M = N_2 + M$
29	$O_3 + OH = HO_2 + O_2$	49	$NH + NH_3 = N_2H_4$
30	$O_2 + OH = H + O_3$	50	$N_2H_4 + H = NH_2 + NH_3$
31	$O_3 + M = O_2 + O + M$	51	$NH + N = N_2 + H$
32	$OH + M = O + H + M$	52	$2NH_2 = NH_3 + NH$
33	$HO_2 + M = H + O_2 + M$	53	$HNO + OH = NO + H_2O$
34	$HO_2 + H_2 = H_2O_2 + H$	54	$HNO + H = NO + H_2$
36	$H + HO_2 = H_2 + O_2$	56	$NH_3 + H = NH_2 + H_2$
37	$OH + HO_2 = H_2O + O_2$	57	$NH_2 + M = NH + H + M$
38	$HO_2 + HO_2 = H_2O_2 + O_2$	58	$N_2H_4 + M = NH + H + M$

Образование  $NO_x$  ( $NO$ ,  $NO_2$ ,  $N_2O$ ) также как и в [1] может протекать по нескольким химическим механизмам (см. табл.): в реакциях расширенного механизма Зельдовича (реакции 8-9), через  $N_2O$  - механизм (реакции 11-16), через  $NO_2$  - механизм (реакции 17-18, 39, 41, 43-45), через появление  $HNO$  (реакции 19, 20, 53, 54), а также в реакциях с образованием аминов  $NH_i$  (типа реакции 26).

В модель включен также блок образования и разрушения озона  $O_3$

(реакции 29-31).

Окисление водорода описывается реакциями 1-9, 21-23 и 32-38.

От предыдущей модели остался также блок образования аминов – это реакции 24-28, 49-52 и 56-58.

Исходными данными для расчетов являлись: теплофизические свойства горючего, свойства и состав воздуха, данные по полным энтальпиям и энтропиям веществ. Константы скоростей обратных реакций определялись через константы скоростей прямых реакций и константы равновесия, которые вычислялись через константы полной диссоциации индивидуальных веществ. Математическая модель построена на системе уравнений суммарных скоростей образования и исчезновения всех 19 веществ, уравнениях материального баланса по  $O$ ,  $H$  и  $N$ , уравнениях состояния идеального газа и Дальтона и на уравнении баланса полной энтальпии. Основным варьируемым параметром в расчетах являлся коэффициент избытка воздуха  $\alpha$ , а при решении системы дифференциальных уравнений кинетики – ещё и время осуществления химических реакций  $\tau$ .

Описываемая модель частично уже апробировалась авторами для расчета равновесного состава и температуры продуктов сгорания, а также для исследования образования «термических» окислов азота  $NO$  в сравнении с их образованием при окислении авиакеросина [2].

Разработанная математическая модель применяется авторами для изучения вклада в образование  $NO_x$  различных химико-кинетических механизмов и отдельных реакций. Рассматриваются начальная, срединная и завершающая стадии общего процесса окисления водорода  $H_2$ . Эта часть исследования выполнялась точно так же, как и для случая окисления авиакеросина  $C_nH_m$  [4].

Расчеты выполнялись для термодинамических условий, характерных для современных и перспективных камер сгорания ГТД для элементарного объема зоны горения, в котором находится и сгорает гомотогенная идеально перемешанная топливовоздушная смесь при следующих допущениях: 1) смесь и продукты сгорания рассматриваются неподвижными в пространстве или движущимися с постоянной скоростью; 2) взаимное скольжение отдельных частей смеси и молекулярная диффузия отсутствуют; 3) химические реакции протекают при  $p = const$  и без

тепло-массообмена с окружающей средой; 4) излучение пламени отсутствует; 5) внутри рассматриваемого объема зоны горения процессы перемешивания протекают бесконечно быстро. То есть, авторами решается в чистом виде только задача химической кинетики.

Последовательно рассмотрено окисление водорода также как и в случае окисления авиакеросина при следующих значениях коэффициента избытка воздуха  $\alpha = 0,8; 1,2$  и  $1,6$ , температуре воздуха  $T_K = 800$  К, давлении  $p_K = 40$  и  $50$  ат.

Расчеты производились в следующей последовательности.

Этап I (равновесный состав). Для каждого варианта по  $\alpha$  и при заданных  $T_K$  и  $p_K$  определялись равновесные состав и температура продуктов сгорания  $T_{ад.пл}$  - адиабатическая температура пламени при условии полного окисления горючего [1] при  $p_K = const$

Этап II (фронт «пламени»). Интервал температур ( $T_{ад.пл} - T_K$ ) разбивался на  $m$  участков ( $\eta = 1 \dots m$ ,  $m = 8 \dots 11$ ) и последовательно для каждого из них определялось время  $\Delta\tau_\eta$ , за которое суммарный процесс «горения» выйдет на температурный уровень конца каждого из участков  $T_\eta$ , и одновременно состав продуктов сгорания для данного этапа развития реакции; при плавном увеличении времени расчет прерывался по моменту достижения равенства полных энтальпий горючей смеси и продуктов реакции; в конечном итоге определялось полное время горения и состав продуктов химического реагирования на момент завершения реакции (полного тепловыделения). Время  $\Delta\tau_\eta$  и состав продуктов сгорания на каждом временном шаге находились из решения системы выше перечисленных уравнений, основу которой составляла система дифференциальных уравнений химической кинетики.

В силу известной «жесткости» систем дифференциальных уравнений химической кинетики для их решения использовались специальные математические методы метод Булирша-Штера, метод Розенброка и метод Radau.

Этап III (пребывание в «послепламенной» зоне). Найденный состав продуктов сгорания далее «выдерживался» при  $p_K, T_{ад.пл} = const$  в течение некоторого времени  $\Delta\tau = 6-12$  мс, в ходе и по истечении которого

опять производился расчет состава продуктов химического реагирования по полной системе уравнений. Таким образом, в расчете моделировалось пребывание продуктов сгорания при высокой температуре в послепламенной зоне. Потери тепла из зоны реакций при этом не учитывались.

Подробное описание результатов авторы планируют изложить в следующей своей работе.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Диденко А.А., Лукачев С.В. Упрощенная математическая модель кинетики окисления углеводородного топлива и образования окислов азота NO. // Тез. докл. IV Всеросс. науч.-техн. конф. «Процессы горения, теплообмена и экология тепловых двигателей». – Самара, 2002.-С.59-66.
2. Диденко А.А., Некрасова С.О. Экологические характеристики ГТД: сравнение уровней концентрации «термических» NO, образующихся при сгорании альтернативного горючего – водорода и традиционного авиационного керосина. // Тез. докл. V междунар. конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ-2004). Самара, 5-10 июля 2004. –М.: Вузовская книга, 2004.-С.86-88.
3. Даутов Н.Г., Старик А.М. К вопросу о выборе кинетической схемы при описании объемной реакции метана с воздухом. // Кинетика и катализ. -1997, том 38. -№2. –С.207-230.
4. Диденко А.А., Некрасова С.О. Анализ химико-кинетических механизмов образования окислов азота NO<sub>x</sub> в условиях камер сгорания ГТД. // Труды Междунар. науч.-техн. конф. «Проблемы и перспективы развития двигателестроения». Самара, 26-27 июня 2004, Часть II. –С.128-135.