

ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ

УДК 621.45.022

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОБАВКИ ВОДОРОДА ИЛИ СИНТЕЗ-ГАЗА К *n*-ДЕКАНУ НА ЭМИССИЮ ВРЕДНЫХ ВЕЩЕСТВ ИЗ КАМЕРЫ СГОРАНИЯ С ГОМОГЕННЫМ РЕЖИМОМ ГОРЕНИЯ

© 2020 г. В. Е. Козлов¹, Н. С. Титова^{1*}, С. А. Торохов¹

¹Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова, Москва, Россия

*E-mail: nstitova@ciam.ru

Поступила в редакцию 25.02.2019;

после доработки 02.07.2019;

принята в печать 22.07.2019

Проведен сравнительный численный анализ турбулентного горения и эмиссии вредных веществ из камеры сгорания с гомогенным режимом горения, работающей на чистом *n*-декане и смесевых топливах *n*-декан/водород и *n*-декан/синтез-газ. Расчеты проведены с использованием программы ANSYS Fluent и редуцированного кинетического механизма, описывающего окисление рассматриваемых топлив. Показано, что добавка водорода или синтез-газа к *n*-декану в соотношении 50/50 по объему приводит к уменьшению температуры как внутри камеры сгорания, так и в ее выходном сечении. Одновременно происходит уменьшение эмиссии оксидов углерода и азота. Обеднение топливовоздушной смеси с коэффициентом избытка воздуха $\alpha = 2.3$ до $\alpha = 2.5$ резко уменьшает эмиссию оксида азота и одновременно существенно увеличивает эмиссию оксида углерода. Суммарный индекс эмиссии NO и CO при таком обеднении увеличивается более чем в два раза.

Ключевые слова: гомогенная камера сгорания, комбинированные топлива, *n*-декан, водород, синтез-газ, эмиссия, численное моделирование.

DOI: 10.31857/S0207401X20050088

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время наблюдается повышенный интерес к использованию альтернативных топлив в двигателях различных транспортных средств [1, 2]. Рассматриваются различные виды альтернативных топлив: водород, природный газ, пропан-бутановые смеси, различные биотоплива и др. Особый интерес представляют смеси традиционных топлив (бензин, керосин, дизельное топливо) с водородом или синтез-газом. Такие добавки могут быть получены непосредственно из основного топлива при его пиролизе или частичном окислении.

Проведены многочисленные экспериментальные и численные исследования по влиянию добавки водорода или синтез-газа на основные характеристики горения углеводородных топлив. Показано, что при добавлении водорода к метану, природному газу, пропану, октану, декану и другим углеводородам увеличиваются ламинарная и турбулентная скорости горения [3–8], а также расширяются пределы устойчивого горения этих топлив [4, 9]. Установлено, что добавка H₂ к легким алканам (CH₄, C₂H₆, C₃H₈) приводит к уменьшению времени задержки воспламенения,

τ_{in} , по сравнению с горючими смесями, содержащими только углеводороды [7, 10–12]. Влияние добавки водорода на воспламенение более тяжелых алканов (например, *n*-гептана, *n*-декана) зависит от начальной температуры горючей смеси. При высокой температуре ($T_0 > 1000$ K) добавка водорода ускоряет воспламенение, а при низкой ($T_0 < 1000$ K), наоборот, замедляет [13–15]. Подмешивание водорода и синтез-газа в углеводородное топливо влияет и на эмиссию вредных веществ в продуктах сгорания, таких как CO, CO₂, NO_x, несгоревших углеводородов (HC), а также сажи [16–18].

Достаточно много работ посвящено исследованию влияния добавки водорода или синтез-газа к бензину или дизельному топливу на характеристики двигателей внутреннего сгорания (см., например, [19, 20]). Исследования влияния таких добавок на горение и эмиссию в камерах сгорания газотурбинных двигателей не столь многочисленны и касаются в основном модельных устройств. В работе [21] экспериментально изучалось влияние добавки водорода к керосино-воздушной смеси на стабильность и структуру пламени, пульсации давления и эмиссию в модель-

ной камере сгорания, представляющей собой цилиндрическую трубу длиной 250 мм и диаметром 80 мм. Рассматривалось горение бедной заранее перемешанной смеси. Показано, что добавка водорода обеспечивает стабильное горение более бедных смесей: до значения коэффициента избытка топлива $\phi = 0.4$ при 10%-ной добавке H_2 . При неизменном значении ϕ добавка H_2 (по крайней мере, в количестве до 10%) слабо влияет на эмиссию NO_x . Однако возможность осуществления горения смеси при меньшем значении ϕ позволяет значительно снизить эмиссию NO_x . Эмиссия CO , напротив, очень чувствительна к добавке H_2 . Причем 2.5%-ная добавка H_2 понижает количество CO на 50%, а при дальнейшем увеличении количества H_2 эмиссия CO уменьшается уже не столь значительно. Небольшое уменьшение эмиссии NO_x и существенное уменьшение эмиссии сажи были зарегистрированы экспериментально в камере сгорания с завихрителем при добавке 10–50% водорода к керосину [22].

Цель экспериментальных исследований [23, 24] – получение данных по влиянию H_2 и реформинг-газа, полученного при конверсии керосина и состоящего преимущественно из H_2 , CO , CO_2 и N_2 , на стабильность пламени и эмиссию при использовании действующей авиационной топливной форсунки. Рассматривались два варианта подачи водорода или реформинг-газа: частично и полностью перемешанная смесь. Стабильность пламени существенно возрастала при использовании добавок, а бедный предел срыва пламени при добавлении H_2 уменьшился с $\phi = 0.53$ до $\phi = 0.35$. При этом вариант с частичным перемешиванием водорода обеспечивал более стабильное пламя за счет формирования плотного водородного факела, который стабилизировал горение керосина. При одинаковой мощности добавка водорода или реформинг-газа увеличила эмиссию NO_x , причем в случае частично перемешанной смеси этот рост оказался больше за счет наличия плотного факела. Эмиссия CO существенно уменьшилась и не зависела от варианта подачи H_2 .

Численные исследования влияния добавки реформинг-газа, полученного при каталитической конверсии базового топлива JP-8, на характеристики горения в камере сгорания с закруткой выполнены в работе [25]. Показано, что для бедных смесей такая добавка повышает полноту сгорания и стабильность пламени. Это позволяет увеличить мощность, уменьшить размер камеры и, следовательно, ее массу. Существенно меньший эффект от добавки реформинг-газа наблюдается при горении стехиометрических или богатых смесей. Авторы этих исследований использовали

для расчетов глобальный реакционный механизм, включающий всего четыре реакции для шести компонентов. Поэтому рассчитать влияние добавки реформинг-газа на эмиссию не представлялось возможным.

Данная работа посвящена численному анализу влияния добавки водорода или синтез-газа к н-декану на эмиссионные характеристики камеры сгорания с гомогенным горением, разработанной в ЦИАМ. В отличие от камер, использованных в предыдущих экспериментальных исследованиях [21, 23, 24], эта камера значительно больше и имеет достаточно обширную зону обратных токов для стабилизации пламени. С целью описания горения в камере и определения эмиссии CO и NO_x использован редуцированный кинетический механизм, описывающий как окисление н-декана, который можно рассматривать в качестве однокомпонентного суррогата керосина, так и образование экологически опасных компонентов CO и NO_x .

КИНЕТИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ

Авиационный керосин – это многокомпонентное топливо, включающее различные алканы, алкены и ароматические соединения. Причем количество алканов в керосине марки Jet-A, среди которых присутствует и н-декан, может достигать 80% [26]. Для численного моделирования горения керосина часто используют смеси, называемые суррогатными, состоящими из одного или нескольких компонентов, которые хорошо воспроизводят характеристики горения керосина. Ранее было экспериментально показано [27, 28], что авиационный керосин Jet-A и однокомпонентный суррогат, состоящий из н-декана, имеют близкие значения времени воспламенения и демонстрируют схожее изменение концентраций основных компонентов при окислении в реакторе идеального смешения. Измерения, проведенные в работах [29, 30], демонстрируют также и близкие значения скорости ламинарного пламени в смесях н-декан/воздух и Jet-A/воздух при атмосферном давлении, начальной температуре ~470 К и $\phi \sim 0.9$ –1.1. Кроме того, теплоты сгорания керосина и н-декана практически одинаковы. Таким образом, сходные механизмы окисления, близкие значения скорости горения и уровня тепловыделения дают основание для использования н-декана в качестве однокомпонентного суррогата керосина, что и сделано в данной работе.

При численном моделировании горения и эмиссии экологически опасных компонентов необходимо применять кинетический механизм, который правильно предсказывает не только величины основных характеристик горения данного

топлива (время воспламенения и скорость пламени), но и значения концентрации экологически опасных соединений, прежде всего нормируемых компонентов NO_x и CO . На сегодняшний день разработано несколько детальных механизмов окисления *n*-декана [31–35], но все они включают в себя более сотни компонентов и тысячи элементарных реакций. Применение таких механизмов даже в двумерных расчетах невозможно из-за их громоздкости. Поэтому необходимо иметь достаточно компактный механизм, который правильно предсказывает величины основных характеристик горения в заданном диапазоне параметров и эмиссию CO и NO . Эти требования означают, что механизм не может быть глобальным, так как глобальные механизмы состоят из одной или нескольких реакций и не содержат радикалов, которые участвуют в реакциях, приводящих к образованию CO и NO . То есть этот механизм должен включать в себя основные каналы развития цепного процесса в горючей смеси и основные радикалы, такие как H , O , OH и некоторые другие.

В данной работе для моделирования горения *n*-декана в камере сгорания был использован редуцированный механизм [36], удовлетворяющий этим требованиям. Этот механизм был создан на основе детального механизма [35] путем последовательного исключения второстепенных и мало значимых каналов (компонентов и реакций с их участием) развития цепного процесса. При этом на каждом шаге редуцирования проверялась способность сокращенного механизма описывать экспериментальные данные. При моделировании горения гомогенной смеси *n*-декан/воздух с добавками H_2 или синтез-газа в камере сгорания необходимо, чтобы кинетический механизм правильно описывал прежде всего скорость пламени в смесях H_2 /воздух, H_2 /CO/воздух и *n*- $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ /воздух при разных температурах. Поэтому в процессе редуцирования особое внимание уделялось именно этому параметру. Также постоянно контролировалась способность механизма воспроизводить время задержки воспламенения.

В итоге редуцированный кинетический механизм окисления *n*-декана содержит 185 реакций с участием 33 компонентов: O , O_2 , H , H_2 , OH , NO_2 , H_2O , H_2O_2 , CO , CO_2 , HCO , CH_2O , CH_3O , CH_2 , CH_3 , CH_4 , C_2H_2 , C_2H_3 , C_2H_4 , C_2H_5 , C_2H_6 , C_3H_5 , C_3H_6 , C_3H_7 , C_4H_8 , C_4H_9 , C_5H_{10} , C_5H_{11} , C_6H_{12} , C_6H_{13} , C_7H_{15} , $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$, *n*- $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$. Следует отметить, что механизмы окисления H_2 и H_2 /CO, которые входят в состав детального механизма окисления смеси *n*- $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ /воздух как составные части, не подвергались редуцированию, так как, во-первых, они содержат небольшое количество компо-

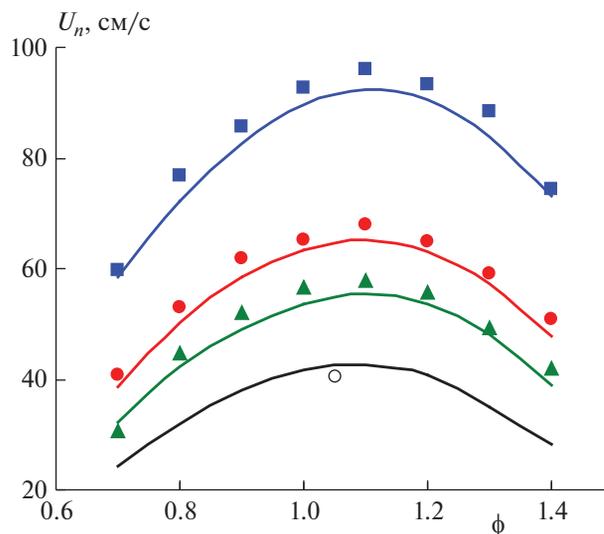


Рис. 1. Зависимость $U_n(\phi)$ для смеси *n*- $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ /воздух при разной начальной температуре T_0 и давлении $P_0 = 1$ атм. Символы – экспериментальные данные: \circ – [39] при $T_0 = 300$ К, \blacktriangle и \bullet – [29] соответственно при $T_0 = 360$ и 400 К, \blacksquare – [40] при $T_0 = 500$ К. Линия – расчет по редуцированному механизму окисления *n*- $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$.

нентов: 8 компонентов (O , O_2 , H , H_2 , OH , NO_2 , H_2O , H_2O_2) для механизма H_2 /воздух и еще четыре дополнительных компонента (CO , CO_2 , HCO , CH_2O) для описания окисления синтез-газа, а во-вторых, все эти компоненты оказались принципиальными для правильного предсказания значений скорости пламени, времени воспламенения и конечной температуры продуктов сгорания. В связи с этим дополнительное тестирование редуцированного механизма на экспериментах по воспламенению и горению смесями H_2 /воздух и H_2 /CO/воздух, которое было проведено ранее (см., например, [37, 38]), не потребовалось.

На рис. 1 приведено сравнение скорости ламинарного пламени U_n в смеси *n*- $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ /воздух, измеренной в [29, 39, 40] и рассчитанной с использованием редуцированного механизма окисления *n*- $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$. Видно, что механизм хорошо воспроизводит зависимость $U_n(\phi)$ при различной начальной температуре T_0 горючей смеси. Максимальная скорость ламинарного пламени реализуется для немного обогащенной смеси ($\phi = 1.1$) и изменяется от $U_n \sim 40$ см/с при $T_0 = 300$ К до $U_n \sim 90$ см/с при $T_0 = 500$ К и атмосферном давлении.

Дополнительный контроль предсказательной способности редуцированного механизма показал, что последний хорошо воспроизводит время задержки воспламенения τ_{in} смеси *n*- $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ /воздух при температуре $T_0 > 1100$ К. На рис. 2 приведено

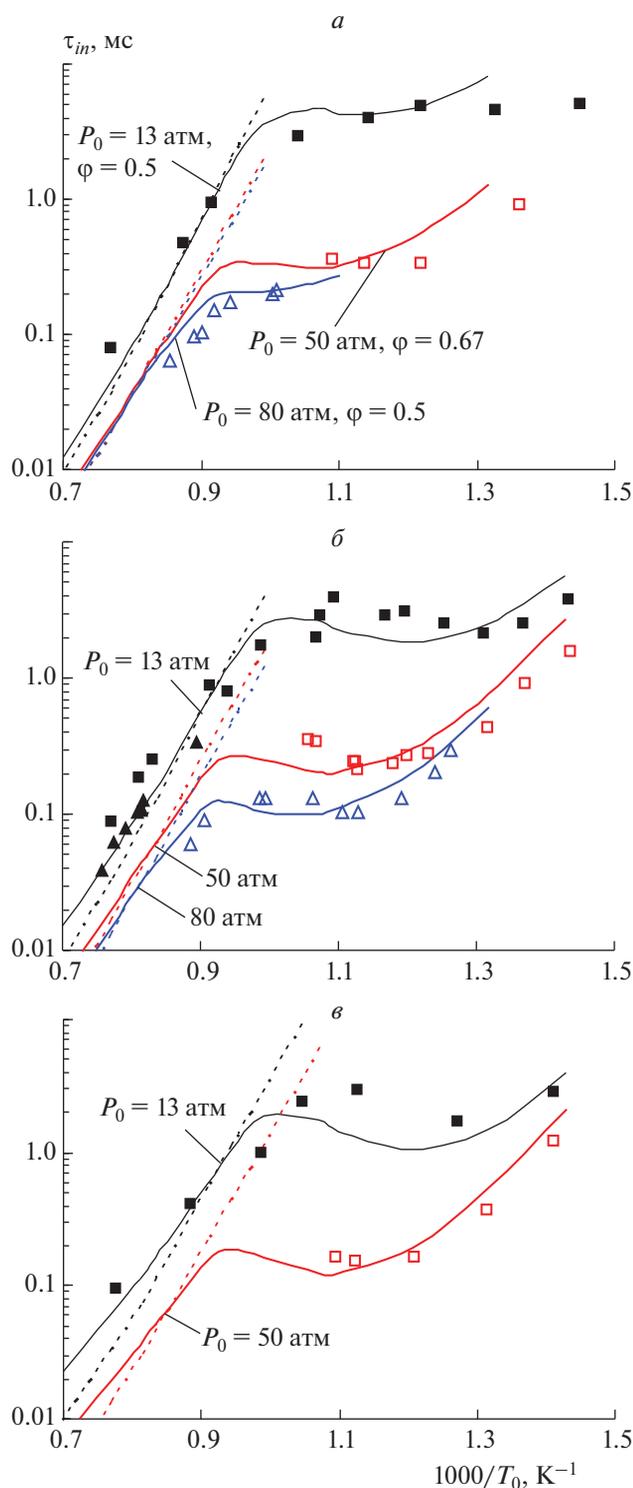


Рис. 2. Время задержки воспламенения τ_{in} : *a* – в бедной ($\phi = 0.5$ и 0.67), *б* – стехиометрической ($\phi = 1$) и *в* – богатой ($\phi = 2$) смесях $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{воздух}$ при $P_0 = 13, 50$ и 80 атм. Символы – экспериментальные данные: ■, □ – [41]; ▲, △ – [42]; сплошные и штриховые линии – расчет по детальному [35] и редуцированному механизмам соответственно.

сравнение значений τ_{in} , измеренных в [41, 42] и рассчитанных с использованием детального [35] и редуцированного [36] механизмов окисления $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$, в зависимости от начальной температуры смеси T_0 при разных значениях ϕ и начальном давлении $P_0 = 13, 50$ и 80 атм. Видно, что детальный и редуцированный механизмы дают близкие значения τ_{in} при $T_0 \geq 1100$ К и воспроизводят экспериментальные данные при такой температуре с достаточной степенью точности. Отклонение рассчитанных с использованием редуцированного механизма значений τ_{in} от измеренных в эксперименте при $T_0 < 1100$ К обусловлено тем, что с целью минимизации механизма из него был исключен низкотемпературный канал окисления n -декана. Отметим, что этот канал, протекающий через образование алкилпероксидных радикалов, важен только для правильного предсказания времени воспламенения при низких температурах и не влияет на скорость горения.

Таким образом, редуцированный реакционный механизм окисления $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ [36] может использоваться для проведения многомерных (CFD) расчетов в задачах, где распространение пламени определяет процесс сжигания горючей смеси, а также в задачах, где основным процессом является воспламенение, если температура исходной газовой смеси $T_0 \geq 1100$ К.

Редуцированный механизм окисления n -декана был дополнен блоком реакций, описывающих образование N -содержащих компонентов [43]. Для предсказания эмиссии оксидов азота были учтены термический механизм и N_2O -механизм образования NO . Механизм Фенимора (или $gromt$ -механизм), который вносит вклад в образование NO в богатых смесях, не учитывался, так как в работе проводилось моделирование горения очень бедных смесей. Итоговый механизм дополнительно включает реакции с участием еще пяти компонентов: N, N_2, NO, NO_2 и N_2O . Тестирование механизма образования NO проведено в работах [43, 44] на экспериментальных данных по изменению концентрации NO во фронте ламинарного пламени [45] и в горелке Бунзена [46] для смеси $CH_4/\text{воздух}$.

МЕТОДОЛОГИЯ

Численное исследование проведено для гомогенной камеры сгорания, конструкция которой была разработана ранее в ЦИАМ [47, 48]. Схема камеры представлена на рис. 3. Испарение жидкого топлива и его перемешивание с воздухом происходят на участке от места подачи топлива до среза стабилизатора пламени. Стабилизатор имеет ко-

ническую форму и размещен в коническом диффузоре жаровой трубы. За стабилизатором формируется центральная зона обратных токов большого размера, которая стабилизирует пламя. Из-за достаточно большого времени пребывания топливоздушнoй смеси в этой зоне расширяется граница бедного срыва пламени. Это позволяет сжигать сильно обедненные смеси, что улучшает эмиссионные характеристики камеры сгорания.

Моделирование процессов горения в такой камере проводилось в двумерной осесимметричной постановке на основе уравнений RANS со стационарными условиями на входной границе расчетной области. В качестве модели турбулентности использовалась широко распространенная *k-epsilon* realizable model (подробнее см. в [49]). Ранее проведенные расчеты [44, 50, 51] показали, что для случая горения метановоздушной смеси в модельной камере сгорания хорошо себя зарекомендовала так называемая “квазиламинарная” (QL) модель горения, в которой используется модель турбулентности для описания эффектов смешения, но не учитывается взаимодействие химических источников с турбулентностью. Эта QL-модель горения использовалась и в данной работе. Расчеты выполнены с использованием программы ANSYS Fluent [49].

На входе в расчетную область задавалось направление вектора скорости потока, обеспечивающее закрутку по закону “твердого тела”. Угол закрутки потока во входном сечении составлял 30°, статическая температура T_{in} задавалась одинаковой по всему входному сечению, давление P_{in} , расход смеси $G = 1.6$ кг/с. Температура стенок камеры полагалась постоянной и равной T_w . Параметры турбулентности на входе в камеру задавались такими же, как в работе [50]: $k_{in} = 67$ м²/с², $\epsilon_{in} = 11090$ м²/с³.

Рассмотрены два режима горения:

режим 1 – $\alpha = 2.3$, $T_{in} = 688$ К, $T_w = 1000$ К, $P_{in} = 16$ атм;

режим 2 – $\alpha = 2.5$, $T_{in} = 740$ К, $T_w = 500$ К, $P_{in} = 20$ атм,

для трех типов топлива – н-C₁₀H₂₂, н-C₁₀H₂₂/H₂ = 50/50 и н-C₁₀H₂₂/H₂/CO = 50/25/25 (здесь дано мольное соотношение компонентов, что равно массовой доле водорода или синтез-газа в топливе 1.4% и 9.4% соответственно).

Для исследования сходимости решения по сетке проведены расчеты на нескольких сетках. Исходная сетка, содержащая 1800 ячеек, представлена на рис. 4. После проведения расчета на исходной сетке она измельчалась. Вблизи стенки измельчение осуществлялось до достижения в при-

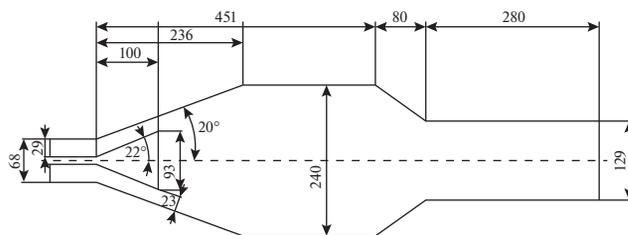


Рис. 3. Схема гомогенной камеры сгорания (размеры даны в мм).

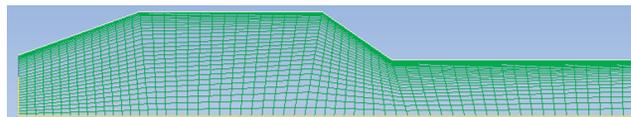


Рис. 4. Исходная сетка (1800 ячеек).

стеночных расчетных ячейках значения $y^+ < 5$, где y^+ – безразмерное расстояние от стенки, определяемое по формуле

$$y^+ = yU_\tau/\nu, \quad U_\tau = (\tau_w/\rho)^{0.5}.$$

Здесь y – расстояние от стенки, ν – ламинарный кинематический коэффициент вязкости, τ_w – напряжение трения на стенке, ρ – плотность. Так как ламинарный подслои турбулентного пограничного слоя занимает именно эту область: $y^+ < 5$ [52, 53], то в этом случае в программе ANSYS Fluent применяется линейный закон распределения скорости. Вдали от стенки измельчение ограничивалось дроблением исходных ячеек на четыре части. После этого проводился новый расчет. Эта процедура повторялась несколько раз. Самая мелкая сетка содержала 116640 ячеек (вычислительные ресурсы используемого 8-ядерного персонального компьютера с оперативной памятью 8 ГБ не позволили рассматривать сетки с большим числом ячеек). Результаты расчетов эмиссии оксида углерода на самой мелкой сетке (116640 ячеек) отличаются от расчетов на предыдущей, более крупной сетке (30960 ячеек) на 20%. Все последующие расчеты были выполнены на самой мелкой сетке. В расчетах данной работы условие $y^+ < 5$ реализуется практически вдоль всей охлаждаемой стенки длиной L (так как на входе в расчетную область пограничные слои не учитывались, то это условие не выполняется для небольшого начального участка) для всех трех рассматриваемых топлив. На рис. 5 зависимость $y^+(L)$ представлена для режима 1.

Расчеты проводились итерационным способом (Steady) с двойной точностью и третьим порядком аппроксимации. Итерационный счет выполнялся до сходимости значений параметров течения. Для

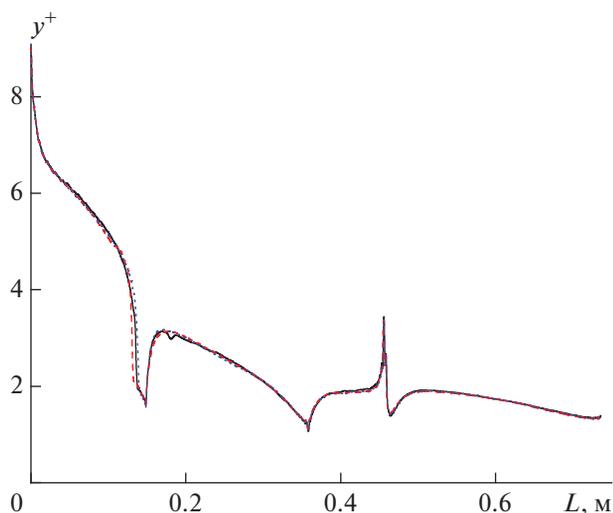


Рис. 5. Распределения сеточной величины y^+ вдоль стенки: сплошная кривая – $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$, штриховая – $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2$, точечная – $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2/\text{CO}$.

примера сходимости расчета по итерациям на рис. 6 приведена динамика изменения осредненной температуры и массовой доли NO на выходе из камеры сгорания для режима 1. Видно, что сходимость достигнута даже для компонента с достаточно малой концентрацией.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Режим 1

На рис. 7 представлены рассчитанные поля температуры при горении трех топливоздушных смесей с коэффициентом избытка воздуха $\alpha = 2.3$. Температура стенки камеры в этом режиме равна $T_w = 1000$ К. Видно, что в этом случае фронт пламени достаточно крутой и приближается к стенке еще до точки, когда площадь поперечного сечения камеры становится постоянной.

Добавка H_2 или синтез-газа принципиально не изменяет поля температуры. Однако фронт пламени становится чуть более крутым и немного раньше достигает стенки. Это свидетельствует об увеличении скорости горения. Кроме того, уменьшается как максимальная температура газа на всех полях (это хорошо видно на рис. 7), так и температура на выходе из камеры сгорания (рис. 8). На оси камеры в выходном сечении температура падает с ~ 1990 К при горении чистого n -декана до ~ 1850 К при добавке синтез-газа и до ~ 1820 К при добавке H_2 , т.е. на $140\text{--}170$ К. Уменьшается при этом и осредненная температура на выходе из камеры сгорания, T_{av} (см. табл. 1).

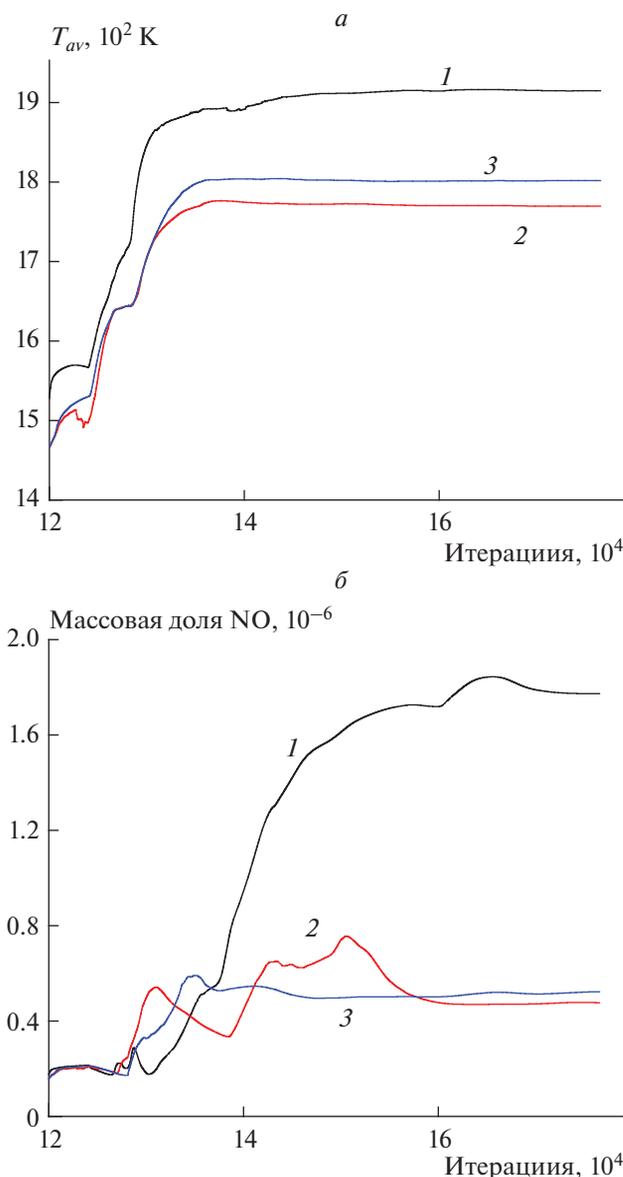


Рис. 6. Динамика сходимости осредненной температуры (а) и массовой доли NO (б) на выходе из камеры сгорания при горении $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ (1), $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2$ (2) и $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2/\text{CO}$ (3) для режима 1.

Наибольшая концентрация CO наблюдается во фронте пламени. Это видно из рис. 9, на котором укрупненно показана область фронта горения. Причем добавка H_2 или синтез-газа понижает максимальное значение массовой доли CO, которое реализуется вблизи стенки: с $2.6 \cdot 10^{-2}$ при горении чистого n -декана, до $\sim 2 \cdot 10^{-2}$ при добавке водорода или синтез-газа.

В выходном сечении CO присутствует лишь в очень узкой пристеночной области, а в ядре потока в условиях высокой температуры и избытка кислорода он быстро окисляется до CO_2 и его

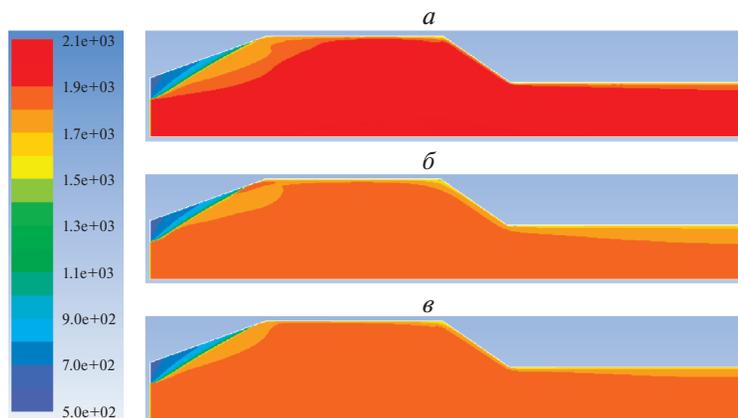


Рис. 7. Рассчитанные поля температуры в камере сгорания при горении $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ (а), $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2$ (б) и $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2/\text{CO}$ (в) в воздухе для режима 1.

концентрация низка. Рассчитанная средняя концентрация CO в выходном сечении камеры при горении чистого декана составила 41.8 ppm в пересчете на 15% O_2 . Эта величина хорошо согласуется с измеренным значением в 50 ppm при содержании O_2 в исходной смеси 15% [48]. Добавка водорода или синтез-газа приводит к уменьшению эмиссии оксида углерода на выходе из камеры сгорания на 7–20% (см. табл. 1), несмотря на общее уменьшение температуры продуктов сгорания.

На рис. 10 представлены поля массовой доли NO для трех рассматриваемых топлив. Видно, что более высокая концентрация NO наблюдается при горении чистого n -декана. Причем наибольшее количество NO в этом случае сосредоточено в осевой, самой горячей области, где массовая доля NO достигает $2.1 \cdot 10^{-4}$. Температура газа здесь превышает 1950 К (см. рис. 7а и 8), и, следовательно, интенсивно работает термический механизм образования NO . При добавке H_2 или синтез-газа концентрация NO становится значительно меньше (см. рис. 10б и 10в), что происходит вследствие более низкой температуры газа. Температура на оси не превышает 1830 К при добавке H_2 и 1860 К при добавке синтез-газа. При таких значениях температуры термический механизм образования NO развивается значительно медленнее.

Распределения массовой доли NO по радиусу на выходе из камеры приведены на рис. 11а. Обращает на себя внимание то, что при горении $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ концентрация NO максимальна в осевой зоне ($y \sim 0$) и ее значение уменьшается при приближении к охлаждаемым стенкам. Из рис. 11б видно, что непрерывный рост концентрации NO на оси продолжается вдоль всей камеры (кроме области около торца стабилизатора, куда подмешивается

газ с фронта с меньшей концентрацией NO). И к концу камеры концентрация NO достигает практически равновесного значения.

При горении смесевых топлив температура газа в камере $T < 1900$ К, поэтому термический механизм образования NO очень медленный. Последнее следует из того, что массовая доля NO не увеличивается вдоль оси камеры в этом случае (рис. 11б). В результате концентрация NO на оси в выходном сечении в ~ 6 раз меньше по сравнению со случаем горения n -декана. Обратим внимание, что количество NO в выходном сечении камеры немного больше вблизи стенки, чем на оси (рис. 11а). Определяющим фактором в этом случае, по-видимому, является время пребывания

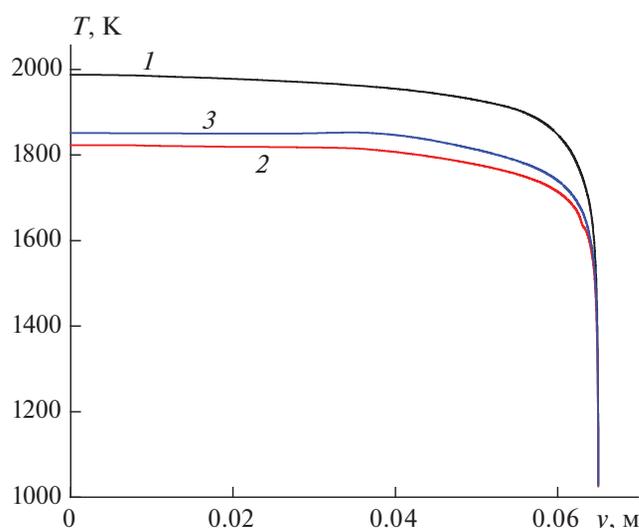


Рис. 8. Распределения температуры по радиусу на выходе из камеры сгорания при горении $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ (1), $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2$ (2) и $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2/\text{CO}$ (3) для режима 1.

Таблица 1. Температура на оси T_{ax} , средняя температура T_{av} , массовые доли и концентрации CO и NO в выходном сечении камеры, а также индексы эмиссии CO и NO для трех рассмотренных топлив и двух режимов горения

Топливо	T_{av} , К	T_{ax} , К	CO, массовая доля	CO, ppm (15% O ₂)	EICO, г/кг топлива	NO, массовая доля	NO, ppm (15% O ₂)	EINO, г/кг топлива	EI, г/кг топлива
Режим 1									
н-C ₁₀ H ₂₂	1915	1988	$5.89 \cdot 10^{-5}$	41.8	2.04	$12.8 \cdot 10^{-5}$	90.7	4.73	6.77
н-C ₁₀ H ₂₂ /H ₂	1770	1823	$5.08 \cdot 10^{-5}$	33.9	1.79	$3.45 \cdot 10^{-5}$	23	1.3	3.09
н-C ₁₀ H ₂₂ /H ₂ /CO	1802	1851	$5.6 \cdot 10^{-5}$	38.8	1.8	$3.79 \cdot 10^{-5}$	26.2	1.31	3.11
Режим 2									
н-C ₁₀ H ₂₂	1588	1662	$37.5 \cdot 10^{-5}$	264	14	$1.96 \cdot 10^{-5}$	13.8	0.79	14.8
н-C ₁₀ H ₂₂ /H ₂	1560	1652	$19 \cdot 10^{-5}$	132	7.25	$0.69 \cdot 10^{-5}$	4.79	0.28	7.53
н-C ₁₀ H ₂₂ /H ₂ /CO	1558	1643	$18.9 \cdot 10^{-5}$	132	6.6	$1.43 \cdot 10^{-5}$	10	0.54	7.14

ния газа в области с повышенной температурой. Из-за меньшей скорости потока вблизи стенки время пребывания газа здесь больше и, следовательно, немного больше концентрация NO.

Осредненные значения концентрации NO в выходном сечении камеры (см. табл. 1) свидетельствуют о примерно четырехкратном уменьшении эмиссии оксида азота на выходе из камеры сгорания в результате добавки в н-декан водорода или синтез-газа. Заметим, что экспериментальное значение эмиссии оксида азота на выходе из камеры сгорания в случае горения керосина на этом режиме составило всего 5 ppm при содержании O₂ в исходной смеси 15% [48], что значительно меньше расчетного значения в 90.7 ppm при том же количестве O₂. Мы связываем такое различие с тем, что при данных условиях температура продуктов сгорания соответствует такому уровню, когда скорость термического механизма образования NO очень сильно (экспоненциально) зависит от температуры. Поэтому для точного

предсказания значений температуры необходимо знать характеристики экспериментальной установки, в том числе и температуру охлаждаемых стенок камеры сгорания. В работе [48] температура стенок не измерялась, поэтому в расчете значение T_w было выбрано достаточно произвольно.

Режим 2

Второй режим горения отличается прежде всего тем, что рассматривается еще более бедная топливовоздушная смесь ($\alpha = 2.5$) и предполагается более низкая температура стенок камеры ($T_w = 500$ К). Оба этих изменения должны замедлить горение, понизить температуру продуктов сгорания и, следовательно, уменьшить концентрацию NO. Однако непонятно, как это повлияет на эмиссию CO, а также на суммарную эмиссию CO и NO.

На рис. 12 приведены рассчитанные поля температуры для режима 2. Видно, что фронт пламени стал более протяженным и заканчивается те-

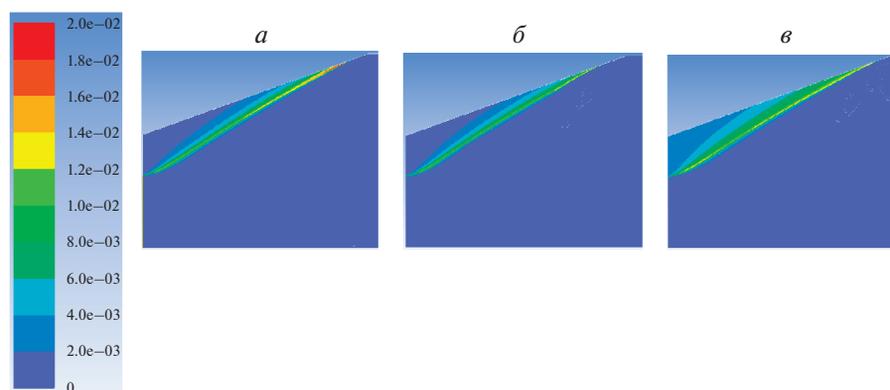


Рис. 9. Рассчитанные поля массовой доли CO в камере сгорания при горении н-C₁₀H₂₂ (а), н-C₁₀H₂₂/H₂ (б) и н-C₁₀H₂₂/H₂/CO (в) в воздухе для режима 1.

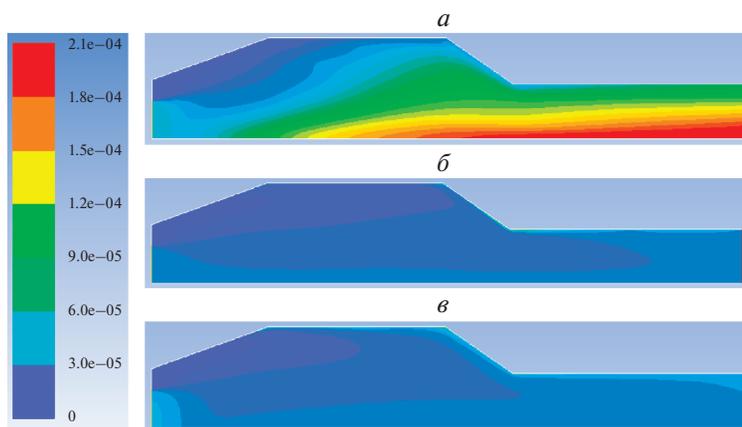


Рис. 10. Рассчитанные поля массовой доли NO в камере сгорания при горении $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ (а), $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2$ (б) и $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2/\text{CO}$ (в) в воздухе для режима 1.

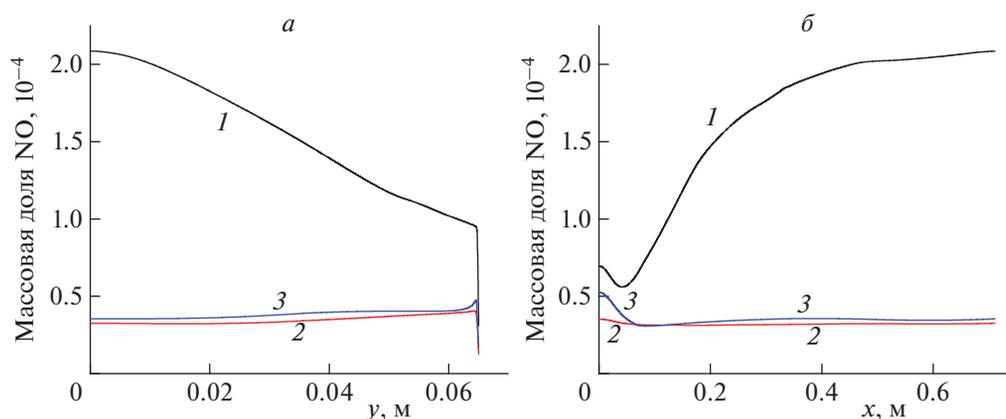


Рис. 11. Распределения массовой доли NO по радиусу камеры на ее выходе (а) и вдоль оси (б) при горении $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ (1), $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2$ (2) и $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2/\text{CO}$ (3) для режима 1.

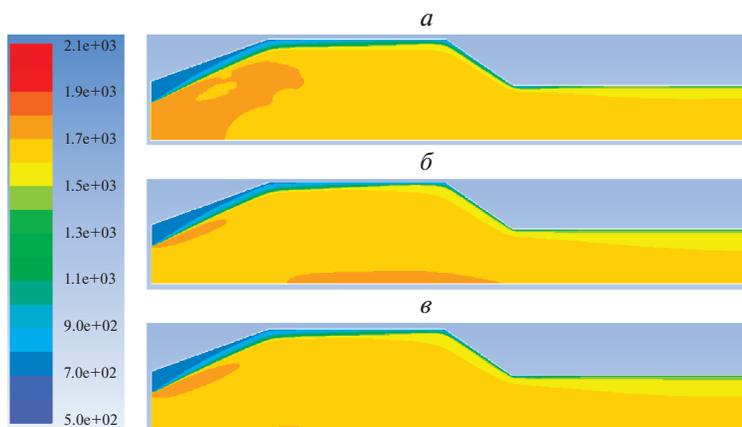


Рис. 12. Рассчитанные поля температуры в камере сгорания при горении $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ (а), $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2$ (б) и $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2/\text{CO}$ (в) в воздухе для режима 2.

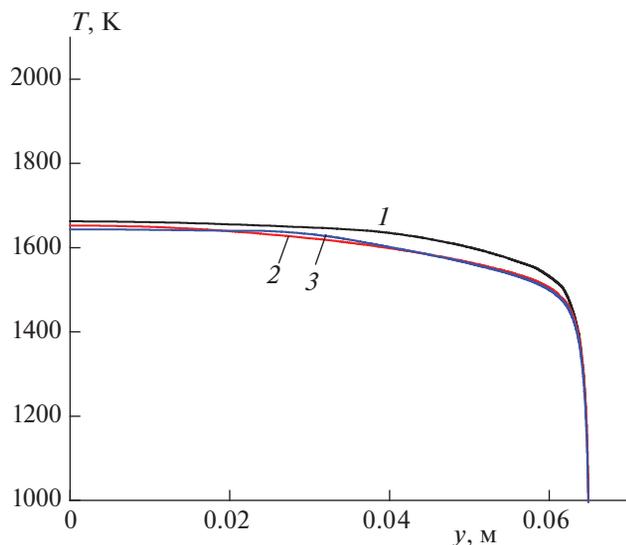


Рис. 13. Распределения температуры по радиусу на выходе из камеры сгорания при горении $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ (1), $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2$ (2) и $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2/\text{CO}$ (3) для режима 2.

перь в выходном канале камеры сгорания. Обусловлено это уменьшением скорости горения за счет двух факторов: обеднения смеси и уменьшения температуры газа вблизи более холодных стенок камеры сгорания (по сравнению с режимом 1). Максимальная температура во всем поле не превышает 1800 К. Добавка H_2 или синтез-газа в этом режиме уменьшает уровень температуры как внутри, так и на выходе камеры не столь существенно, как в режиме 1. Количественно это отличие видно на рис. 13, где представлено распределение темпера-

туры продуктов сгорания по радиусу камеры на ее выходе. При добавке H_2 или синтез-газа температура продуктов сгорания уменьшается на 10–20 К вблизи оси камеры и до 38 К на расстоянии 4–5 см от оси. В итоге осредненная температура на выходе из камеры, T_{av} , уменьшается на 28–30 К (см. табл. 1).

Наибольшее количество CO наблюдается во фронте пламени, который в данном режиме простирается практически вдоль всей холодной стенки ($T_w = 500$ К). Здесь из-за более низкой температуры окисление CO до CO_2 происходит медленнее, чем в зоне обратных токов за стабилизатором, где температура достигает 1600–1800 К (см. рис. 14). Видно, что протяженность области с высокой концентрацией CO немного уменьшается в случае добавки водорода или синтез-газа.

На рис. 15 показано распределение массовой доли CO по радиусу на выходе из камеры сгорания. Максимальное значение массовой доли CO в выходном сечении наблюдается вблизи стенки, куда поступают продукты горения непосредственно из фронта пламени. Максимум массовой доли CO равен $2.65 \cdot 10^{-3}$ при горении чистого n -декана и несколько меньше для смесевых топлив: $2.3 \cdot 10^{-3}$ и $2 \cdot 10^{-3}$ для $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2$ и $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2/\text{CO}$ соответственно. Именно эта область, примыкающая к стенке камеры, дает основной вклад в эмиссию CO . В ядре потока концентрация CO на два и более порядков меньше максимального значения. Поэтому осредненные значения массовых долей CO значительно меньше максимальных значений и составляют $37.5 \cdot 10^{-5}$ для $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ и $\sim 19 \cdot 10^{-5}$ для смеси $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ с добавкой H_2 или синтез-газа (см.

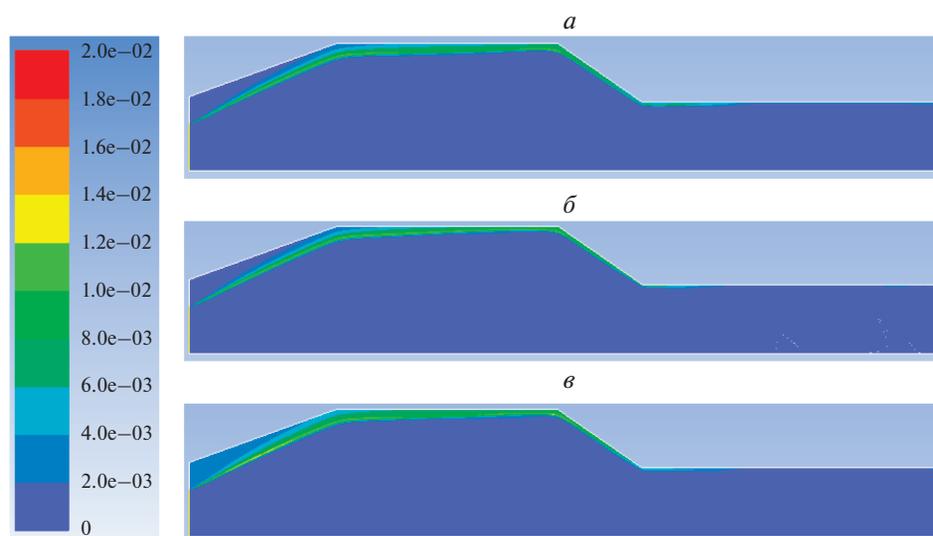


Рис. 14. Рассчитанные поля массовой доли CO в камере сгорания при горении $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ (а), $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2$ (б) и $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2/\text{CO}$ (в) в воздухе для режима 2.

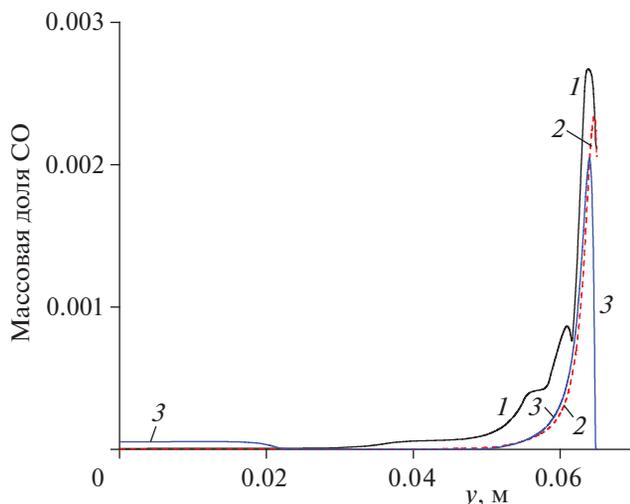


Рис. 15. Распределение массовой доли CO по радиусу на выходе из камеры при горении $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ (1), $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2$ (2) и $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{H}_2/\text{CO}$ (3) для режима 2.

табл. 1). Таким образом, добавка H_2 или H_2/CO уменьшает эмиссию CO в два раза (для режима 1 эффект был меньше, только 7–20%). Но даже при использовании добавок эмиссия CO оказывается в этом режиме ($\alpha = 2.5$) существенно больше, чем при горении чистого декана при $\alpha = 2.3$ (см. табл. 1). Напомним, что в режиме 1 фронт пламени, где присутствует наибольшее количество CO, расположен в начале камеры и не достигает ее выходного сечения (см. рис. 7 и 9).

Расчеты показали, что для режима 2 ($\alpha = 2.5$) эмиссия NO крайне низкая. Осредненная массовая доля NO в выходном сечении находится в диапазоне от $0.7 \cdot 10^{-5}$ до $2 \cdot 10^{-5}$ для рассматриваемых топлив (см. табл. 1). Эти величины соответствуют значению индекса эмиссии оксида азота $E_{\text{INO}} = 0.3\text{--}0.8$ г/кг топлива. Концентрации других азотсодержащих компонентов, таких как NO_2 и N_2O , значительно меньше, в 20 и 10 раз соответственно, чем эмиссия NO. Причиной такого низкого значения E_{INO} является то, что температура газа во всей камере сгорания в режиме 2 не превышает 1800 К. При такой температуре образование NO по термическому механизму протекает медленно и его концентрация к выходному сечению камеры не достигает равновесного значения. Вклад других механизмов в образование NO также мал [54]. Таким образом, полученные результаты свидетельствуют об очень низком значении индекса E_{INO_x} (не превышающем единицы) на выходе из камеры сгорания для всех трех рассмотренных топлив, который в 15–20 раз ниже, чем индекс E_{ICO} .

Для того чтобы проверить вывод о столь низком уровне эмиссии NO на данном режиме, был выполнен дополнительный расчет, основанный на постпроцессорной обработке основного расчета по методологии программы ANSYS Fluent [49]. Для случая горения чистого n-декана было проведено два расчета. В первом расчете учитывалось два механизма образования NO: термический и N_2O -механизм. Во втором расчете дополнительно учитывался механизм prompt. Сравнение результатов этих расчетов показало, что концентрация NO в выходном сечении камеры сгорания определяется работой только первых двух механизмов. При горении чистого n-декана массовая доля NO на выходе, рассчитанная с помощью постпроцессора, оказалась равной $1.23 \cdot 10^{-5}$, что даже несколько ниже, чем получено в результате сквозного счета: $1.96 \cdot 10^{-5}$.

В табл. 1 представлены также значения индексов эмиссии CO, NO и их суммарный индекс эмиссии EI для всех режимов. При горении чистого n-декана $E_{\text{I}} = 6.8$ г/кг топлива при $\alpha = 2.3$ и $E_{\text{I}} = 14.8$ г/кг топлива при $\alpha = 2.5$. То есть обеднение смеси с $\alpha = 2.3$ до $\alpha = 2.5$ привело к увеличению суммарного индекса эмиссии за счет резкого увеличения индекса эмиссии оксида углерода. Таким образом, режим с $\alpha = 2.3$ оказался более экологически чистым. Из табл. 1 также видно, что добавка H_2 или синтез-газа уменьшает суммарный индекс эмиссии в 2 раза в обоих режимах горения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С использованием редуцированного кинетического механизма окисления $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ (33 компонента, 186 реакций) выполнено двумерное численное моделирование турбулентного гомогенного горения бедных топливоздушных смесей ($\alpha = 2.3$ и 2.5) и образования вредных примесей в камере сгорания, работающей на n-декане и смесях n-декана с водородом или синтез-газом. Тестирование механизма на экспериментальных данных показало, что он может использоваться для проведения CFD-расчетов в задачах, где процесс сжигания горючей смеси определяется распространением пламени либо основным процессом является воспламенение, если температура исходной газовой смеси $T_0 \geq 1100$ К.

Расчеты показали, что добавка H_2 или синтез-газа к n-декану (в количестве 50% по объему от всего топлива) не изменяет картину горения в камере, но приводит к понижению температуры как внутри камеры сгорания, так и в ее выходном сечении. Осредненная температура на выходе уменьшается на ~110–140 К при $\alpha = 2.3$ и на ~30 К

при $\alpha = 2.5$. Несмотря на уменьшение температуры при добавке H_2 или синтез-газа, индекс эмиссии CO также уменьшается: до 20% при $\alpha = 2.3$ и до ~50% при $\alpha = 2.5$.

Индекс эмиссии NO для рассмотренных режимов горения достаточно низкий ($EINO < 5$ г/кг топлива при $\alpha = 2.3$ и $EINO < 1$ г/кг топлива при $\alpha = 2.5$) и также уменьшается при добавке H_2 или синтез-газа. Однако обеднение смеси с $\alpha = 2.3$ до $\alpha = 2.5$ приводит к резкому росту индекса эмиссии оксида углерода, в результате чего суммарный индекс эмиссии увеличивается более чем вдвое. Таким образом, режим с $\alpha = 2.3$ оказывается более экологически чистым.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 17-08-01423_а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Verhelst S., Wallner T. // Prog. Energy Combust. Sci. 2009. V. 35. P. 490.
2. Blakey S., Rye L., Wilson C.W. // Proc. Combust. Inst. 2011. V. 33. P. 2863.
3. Yu G., Law C.K., Wu C.K. // Combust and Flame. 1986. V. 63. № 3. P. 339.
4. Zhang Y., Wu J., Ishizuka S. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2009. V. 34. P. 519.
5. Tang C., Huang Z., Jin C. et al. // Ibid. 2008. V. 33. № 18. P. 4906.
6. Tahtouh T., Halter F., Mounaïm-Rousselle C. // Ibid. 2011. V. 36. № 1. P. 985.
7. Donohoe N., Heufer A., Metcalfe W.K. et al. // Combust. and Flame. 2014. V. 161. № 6. P. 1432.
8. Hui X., Zhang C., Xia M., Sung C.-J. // Ibid. 2014. V. 161. P. 2252.
9. Schefer R.W. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2003. V. 28. P. 1131.
10. Zhang Y., Huang Z., Wei L. et al. // Combust. and Flame. 2012. V. 159. № 3. P. 918.
11. Pan L., Zhang Y., Zhang J. et al. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2014. V. 39. № 11. P. 6024.
12. Man X., Tang C., Wei L. et al. // Ibid. 2013. V. 38. № 5. P. 2523.
13. Aggarwal S.K., Awomolo O., Akber K. // Ibid. 2011. V. 36. № 23. P. 15392.
14. Фролов С.М., Медведев С.Н., Басевич В.Я., Фролов Ф.С. // Хим. физика. 2013. Т. 32. № 8. С. 43.
15. Тумова Н.С., Торохов С.А., Фаворский О.Н., Старик А.М. // Физика горения и взрыва. 2016. Т. 52. № 6. С. 13.
16. Guo H., Smallwood G.J., Liu F. et al. // Proc. Combust. Inst. 2005. V. 30. P. 303.
17. Naha S., Briones A.M., Aggarwal S.K. // Combust. Sci. Technol. 2005. V. 177. P. 183.
18. Guo H., Neill W.S. // Combust. and Flame. 2009. V. 156. P. 477.
19. Kozlov V.E., Chechet I.V., Matveev S.G. et al. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2016. V. 41. № 5. P. 3689.
20. Liu C., Li F., Song H., Wang Z. // Fuel. 2018. V. 233. P. 582.
21. Frenillot J.P., Cabot G., Cazalens M. et al. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2009. V. 34. P. 3930.
22. Hiroyasu H., Arai M., Kadota T., Yoso J. // Bull. JSME. 1980. V. 184. № 23. P. 1655.
23. Burguburu J., Cabot G., Renou B. et al. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2011. V. 36. P. 6925.
24. Burguburu J., Cabot G., Renou B. et al. // Proc. Combust. Inst. 2011. V. 33. № 2. P. 2927.
25. Seibert M., Nieh S. // Intern. J. Hydrogen Energy 2013. V. 38. P. 5911.
26. Edwards T., Maurice L.Q. // J. Propuls. Power. 2001. V. 17. № 2. P. 461.
27. Dean A.J., Penyazkov O.G., Sevruk K.L., Varatharajan B. // Proc. Combust. Inst. 2007. V. 31. P. 2481.
28. Dagaut P., Reuillon M., Cathonnet M., Voisin D. // J. Chim. Phys. 1995. V. 92. P. 47.
29. Kumar K., Sung C.-J. // Combust. and Flame. 2007. V. 151. № 1–2. P. 209.
30. Eberius H., Frank P., Kick T. et al. EU project computational fluid dynamics for combustion no. GRD1-1999-10325, Final report for subtask 1.2.3. (D 1.7); 2001.
31. Dagaut P. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2002. V. 4. P. 2079.
32. Westbrook C.K., Pitz W.J., Herbinet O. et al. // Combust. and Flame. 2009. V. 156. № 1. P. 181.
33. Battin-Leclerc F., Fournet R., Glaude P.A. et al. // Proc. Combust. Inst. 2000. V. 28. P. 1597.
34. Bikas G., Peters N. // Combust. and Flame. 2001. V. 126. № 1/2. P. 1456.
35. Тумова Н.С., Торохов С.А., Старик А.М. // Физика горения и взрыва. 2011. Т. 47. № 2. С. 3.
36. Старик А.М., Безгин Л.В., Копченков В.И., Титова Н.С., Торохов С.А. // Combust. Theory and Modell. 2016. V. 20. № 1. P. 99.
37. Безгин Л.В., Копченков В.И., Шарипов А.С. et al. // Combust. Sci. Technol. 2013. V. 185. № 1. P. 62.
38. Старик А.М., Тумова Н.С., Шарипов А.С., Козлов В.Е. // Физика горения и взрыва. 2010. Т. 46. № 5. С. 3.
39. Wagner P., Dugger G.L. // J. Amer. Chem. Soc. 1955. V. 77. № 1. P. 227.
40. Zhao Z., Li J., Kazakov A. et al. // Combust. Sci. Technol. 2004. V. 177. № 1. P. 89.
41. Pfahl U., Fieweger K., Adomeit G. // Proc. Combust. Inst. 1996. V. 26. P. 781.
42. Zhukov V.P., Sechenov V.A., Starikovskii A.Yu. // Combust. and Flame. 2008. V. 153. № 1/2. P. 130.
43. Старик А.М., Козлов В.Е., Титова Н.С. // Combust. Theory. Model. 2013. V. 17. № 4. P. 579.

44. Козлов В.Е., Старик А.М., Титова Н.С., Ведищев И.Ю. // Физика горения и взрыва. 2013. Т. 49. № 5. С. 17.
45. Konnov A.A., Dyakov I.V., De Ruysck J. // Combust. Sci. Technol. 2001. V. 169. P. 127.
46. Nguyen Q.V., Dibble R.W., Carter C.D. et al. // Combust. and Flame. 1996. V. 105. P. 499.
47. Ведешкин Г.К., Свердлов Е.Д. // Теплоэнергетика. 2005. № 11. С. 10.
48. Свердлов Е.Д., Дубовицкий А.Н., Лебедев А.В., Спиридонов К.И. // Nonequilibrium Processes. V. 2. Fundamentals of Combustion / Eds. Frolov S.M., Lanshin A.I. Moscow: Torus Press, 2020.
49. ANSYS Fluent 18.0. San Diego: ANSYS INC., 2015.
50. Козлов В.Е., Лебедев А.Б., Секундов А.Н., Якубовский К.Я. // Теплофизика высоких температур. 2009. Т. 47. № 6. С. 946.
51. Козлов В.Е., Лебедев А.Б., Секундов А.Н., Якубовский К.Я. // Хим. физика. 2010. Т. 29. № 7. С. 37.
52. Абрамович Г.Н. Прикладная газовая динамика. М.: Наука, 1969.
53. Salim S.M., Cheah S.C. // Proc. Intern. Multiconference of Engineers and Computer Scientists. V. II. Hong Kong, 2009.
54. Свердлов Е.Д. // Экологические проблемы авиации / Под ред. Халецкого Ю.Д. Тр. ЦИАМ № 1347. М.: Горус Пресс, 2010. С. 451.