

УДК 544.452

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭМИССИИ ОКСИДОВ АЗОТА И УГЛЕРОДА ПРИ ТУРБУЛЕНТНОМ ГОРЕНИИ ЧАСТИЧНО ПЕРЕМЕШАННОЙ МЕТАНОВОЗДУШНОЙ СМЕСИ

© 2021 г. В. Е. Козлов\*, Н. С. Титова

ФГУП “Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова”, Москва, Россия

\*E-mail: vekozlov@ciam.ru

Поступила в редакцию 20.12.2020 г.

После доработки 19.01.2021 г.

Принята к публикации 19.05.2021 г.

Проведено двумерное моделирование горения бедной метановоздушной смеси в камере сгорания прямоугольного сечения с обратным уступом. Расчеты выполнены на основе разработанного ранее модифицированного квазиламинарного подхода, отличительной особенностью которого является задание нестационарных профилей компонент скорости и концентрации топлива (в случае неполного смешения топлива и воздуха) на входе в расчетную область, и редуцированного кинетического механизма окисления метана, учитывающего термический и  $N_2O$ -механизмы образования  $NO$ . Проведена валидация как кинетического механизма, так и методики в целом на экспериментальных данных. Расчеты показали, что в случае горения бедной смеси неполнота смешения топлива с воздухом приводит не только к увеличению эмиссии окиси азота, что наблюдалось в экспериментах ранее, но и к увеличению эмиссии окиси углерода. Причем зависимости эмиссии  $NO$  и  $CO$  от интенсивности пульсаций концентрации топлива имеют нелинейный, нарастающий характер. Влияние неполноты смешения на эмиссию окиси углерода в рассмотренной камере оказалось столь же значительным, как и на эмиссию окиси азота.

DOI: 10.31857/S004036442104013X

### ВВЕДЕНИЕ

С целью снижения выброса оксидов азота ( $NO_x$ ) в атмосферу рассматриваются различные способы организации горения в камерах сгорания. Одним из способов является горение бедной предварительно перемешанной смеси. Уменьшение эмиссии  $NO_x$  в этом случае происходит в результате существенного снижения температуры продуктов сгорания за счет сильного разбавления воздухом. Причем для бедных смесей качество предварительного смешения топлива и воздуха очень сильно влияет на эмиссию оксидов азота [1–5]. Минимального количества  $NO_x$  можно добиться при сжигании полностью перемешанной смеси, а неполное перемешивание топлива и воздуха ведет к увеличению эмиссии  $NO_x$ . Обусловлено это тем, что скорость образования  $NO_x$  нелинейно зависит от температуры продуктов сгорания, а следовательно, от коэффициента избытка топлива. Горение чуть более богатой смеси (ближе к стехиометрии) дает большее увеличение концентрации  $NO_x$ , чем происходит уменьшение этой концентрации при горении чуть более бедной смеси. Экспериментально показано, что на первый взгляд совсем небольшой уровень флуктуации концентрации топлива  $c'/\hat{c} =$

$= 10\%$  ( $c'$  – среднеквадратичное отклонение концентрации топлива от среднего значения  $\hat{c}$ ) удваивает эмиссию  $NO_x$  при горении бедной (коэффициент избытка топлива  $\phi = 0.5$ ) метановоздушной смеси [3], а уровень флуктуации  $c'/\hat{c} = 30\%$  увеличивает эмиссию  $NO_x$  при горении смеси  $C_3H_8$ –воздух более чем на порядок [5].

Существуют различные подходы для моделирования горения предварительно перемешанных смесей. Одним из них является так называемый квазиламинарный метод (КЛ) (см., например, [6]). В этом методе используется модель турбулентности для описания эффектов смешения, но не учитывается взаимодействие химических источников с турбулентностью. Расчеты горения гомогенной метановоздушной смеси с использованием этого метода удовлетворительно описывают как эмиссию оксидов азота, так и эмиссию оксида углерода в модельных камерах [7, 8].

Кроме эмиссионных характеристик, важно правильно описывать и характеристики фронта горения, влияние которых (в том числе и утолщение фронта горения) по мере удаления от его начала тем значимее, чем больше обеднена топливовоздушная смесь. Расчеты V-образного пламени с использованием квазиламинарного метода удовлетворительно описывают положение сере-

дины фронта горения, где уровень температуры соответствует 50% от ее изменения на всем фронте [7]. Однако наблюдаемого в эксперименте увеличения толщины фронта пламени по мере удаления от места стабилизации пламени [9] квазиламинарный метод не воспроизводит [10, 11]. Для устранения этого несоответствия в [11] предложена модификация квазиламинарного метода (КЛ-мод) на основе примененной в [10] методики, использующей алгоритмы искусственной турбулентности для задания нестационарных профилей компонент скорости на входной границе расчетной области. Модифицированный метод с хорошей точностью описывает наблюдаемые в эксперименте угол наклона фронта V-образного пламени и его утолщение по мере удаления от места стабилизации пламени [11].

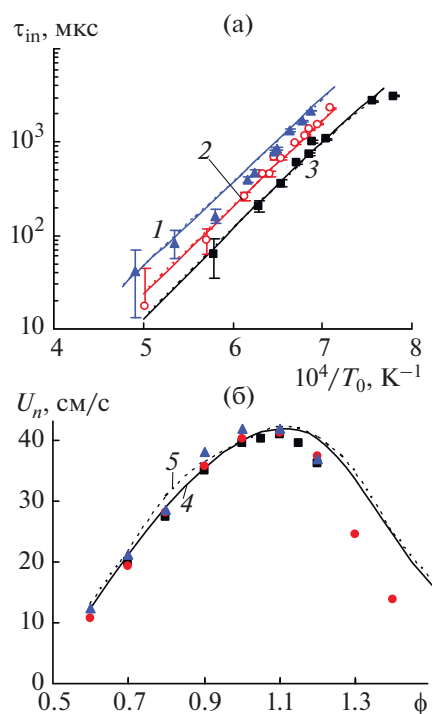
В данной работе этот модифицированный метод применен для расчета горения в модельной камере сгорания (канал прямоугольного сечения с обратным уступом) и анализа влияния полноты смешения топлива (метана) с воздухом на эмиссию оксидов азота и углерода. Если относительно эмиссии оксидов азота этот вопрос, как упоминалось выше, исследован экспериментально [2–5] и известно, что с увеличением неполноты смешения бедных смесей эмиссия оксидов азота увеличивается, то относительно монооксида углерода таких данных найти не удалось. В то же время актуальность проблемы при горении углеродсодержащих топлив возрастает, так как при отмеченной тенденции к сжиганию все более бедных топливовоздушных смесей эмиссия CO становится преобладающей над эмиссией оксидов азота [12]. Заметим, что в применяемом здесь методе расчета (КЛ-мод) используется ряд упрощений (подробнее см. [11]), из-за которых полученные в данной работе результаты носят, скорее, качественный характер.

### КИНЕТИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ

Образование экологически опасных компонентов (прежде всего, нормируемых  $\text{NO}_x$  и CO) при горении является сугубо неравновесным процессом и зависит от концентрации таких активных атомов и радикалов, образующихся в процессе окисления топлива, как H, O, OH, HCO и других. Эволюция данных активных компонентов контролируется кинетикой окисления топлива, что требует при моделировании применения достаточно подробных кинетических механизмов. Использование детальных реакционных механизмов, например GRI 2.11 (49 компонента) или GRI 3.0 (53 компонента) [13], даже для двумерных расчетов требует больших вычислительных ресурсов. Поэтому в данной работе применяется новый редуцированный механизм окисления метана, включающий 23 реагирующих компонента:

O,  $\text{O}_2$ , H,  $\text{H}_2$ , OH,  $\text{HO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{CH}_n$  ( $n = 1-4$ ),  $\text{C}_2\text{H}_m$  ( $m = 1-6$ ), CO,  $\text{CO}_2$ , CHO,  $\text{CH}_2\text{O}$  и  $\text{CH}_3\text{O}$ , которые участвуют в 148 обратимых реакциях. Этот механизм создан на основе детального механизма, разработанного авторами ранее [14], методом последовательного исключения второстепенных и малозначимых компонентов и реакций с их участием. При этом на каждом шаге проводилась проверка способности сокращенного механизма описывать экспериментальные данные по времени воспламенения  $\tau_{\text{in}}$  и скорости ламинарного пламени  $U_n$ . Тестирование редуцированного механизма по  $\tau_{\text{in}}$ ,  $U_n$  и концентрации основных компонентов проведено в диапазоне начальных температур смеси  $T_0 = 300-2000$  К, давлений 1–30 атм и  $\phi = 0.5-2$ .

В качестве примера на рис. 1 представлено сравнение величин  $\tau_{\text{in}}$  и  $U_n$ , рассчитанных с использованием детального [14] и редуцированного механизмов окисления метана, с экспериментальными данными [15–18]. Видно, что редуцированный механизм воспроизводит эксперимент с той же точностью, что и детальный.



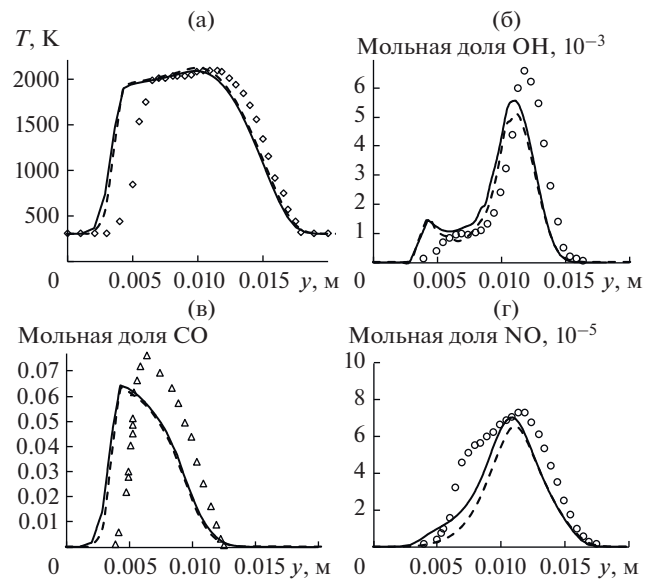
**Рис. 1.** Зависимость времени индукции  $\tau_{\text{in}}$  от начальной температуры  $T_0$  в смеси  $\text{CH}_4\text{--O}_2\text{--Ar}$  при  $\phi = 0.5$  и  $P_0 = 5$  (1), 10 (2) и 20 (3) атм (а); зависимость скорости ламинарного пламени  $U_n$  от  $\phi$  в смеси  $\text{CH}_4\text{--воздух}$  при  $T_0 = 300$  К и  $P_0 = 1$  атм (б): символы – эксперименты [15–18], 4, 5 – результаты расчетов по детальному [14] и редуцированному механизмам соответственно.

Тестирование редуцированного механизма также проведено на распределениях температуры и мольных долей компонентов, полученных в пламени бунзеновской горелки, в которой горение богатой смеси метан–воздух ( $\phi = 1.38$ ) происходит в спутном потоке воздуха [19]. Детальное описание методики таких расчетов приведено в [20]. Так как редуцированный механизм содержит все основные каналы окисления  $\text{CH}_4$  и образования  $\text{CO}$ , то результаты расчета температуры и концентраций  $\text{OH}$  и  $\text{CO}$  по детальному и редуцированному механизмам практически совпадают (рис. 2) и описывают эксперимент с приемлемой точностью. Небольшое расхождение рассчитанных и измеренных значений на внутренней границе пламени объясняется некоторым произволом в задании граничных условий при моделировании.

Для предсказания эмиссии оксидов азота редуцированный механизм был дополнен блоком реакций, описывающих образование  $\text{N}$ -содержащих компонентов [21]. Учтены термический и  $\text{N}_2\text{O}$ -механизмы образования  $\text{NO}$ . Prompt-механизм образования оксида азота, который вносит заметный вклад в образование  $\text{NO}$  при горении богатых смесей и особенно в диффузионных пламенах [22], не учитывался, так как в исследованиях данной работы проводится моделирование горения бедных гомогенных смесей. Таким образом, итоговый механизм дополнительно включает реакции с участием еще пяти компонентов:  $\text{N}$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$  и  $\text{N}_2\text{O}$ . Сравнение профилей мольной доли  $\text{NO}$ , рассчитанных с использованием детального и редуцированного механизмов при горении метана в бунзеновской горелке [19], также представлено на рис. 2. Видно, что по сравнению с детальным механизмом игнорирование prompt-механизма образования  $\text{NO}$  приводит к занижению концентрации  $\text{NO}$  на внутренней границе пламени, где происходит горение богатой смеси ( $\phi = 1.38$ ). В то же время на внешней границе пламени, где первоначально богатая топливно-воздушная смесь разбавляется окислителем при смешении со спутным потоком воздуха, результаты расчета  $\text{NO}$  по редуцированному механизму, учитывающему термический и  $\text{N}_2\text{O}$ -механизмы образования  $\text{NO}$ , полностью совпадают с результатами расчета по детальному механизму [14]. Это дополнительно свидетельствует о том, что основными механизмами образования  $\text{NO}$  при горении бедных заранее перемешанных смесей являются термический и  $\text{N}_2\text{O}$ -механизмы.

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Численное исследование горения метановоздушной смеси и анализ влияния неполноты смешения на эмиссию оксидов азота и углерода проводит-



**Рис. 2.** Распределения температуры (а) и мольных долей  $\text{OH}$  (б),  $\text{CO}$  (в) и  $\text{NO}$  (г) в поперечном сечении пламени, отстоящем на  $x = 21$  мм от поверхности горелки Бунзена, измеренные в [19] (символы) и рассчитанные с использованием детального [14] (сплошные линии) и редуцированного механизмов окисления метана (пунктирные).

ся для модельной камеры сгорания, представляющей собой канал прямоугольного сечения с обратным уступом.

Сначала выполняются методические расчеты для оценки влияния конечно-разностной сетки на расчетные параметры и для сравнения с экспериментальными данными. Для этого выбрана модельная камера сгорания (камера I), горение в которой детально исследовано в [23]. Схема этой плоской камеры с указанием геометрических размеров приведена на рис. 3. На вход в камеру подается метановоздушная смесь с  $\phi = 0.83$ , температурой  $T_0 = 550$  К, давлением  $P = 0.103$  МПа и скоростью  $U_0 = 48$  м/с. Температура стенок камеры в расчетах полагалась равной 550 К.

Моделирование турбулентного горения в данной камере выполнено в двумерной постановке с использованием модифицированного метода (КЛ-мод), описанного в [11]. Отметим, что турбулентные течения являются сугубо трехмерными, поэтому моделирование такого течения в двумерной постановке, проводимое в данной работе, является существенным упрощением. В качестве модели турбулентности используется широко распространенная разновидность  $k-\epsilon$ -модели — “Realizable” [24]. Применяемый КЛ-мод-метод использует нестационарные уравнения Рейнольдса, что позволяет получать значения параметров турбулентного течения для каждого момента времени, которые будем называть “мгно-

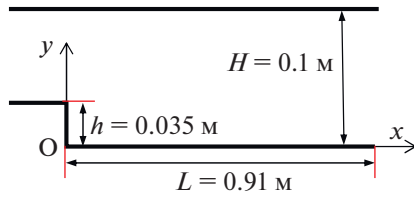


Рис. 3. Схема модельной камеры сгорания [23].

венными значениями”. Эти нестационарные значения подвергались статистической обработке для получения осредненных значений параметров. Осреднение проводилось за интервал времени  $t$  длительностью пятнадцать характерных времен  $t = 15L/U_0$ .

На входе в расчетную область необходимо задать значения интенсивности турбулентных пульсаций  $I = u'/U_0$  и интегрального масштаба турбулентности  $L_t$ . Лучше всего использовать значения  $I$  и  $L_t$ , полученные непосредственным их измерением в турбулентном потоке перед уступом. К сожалению, в эксперименте [23] такие измерения не проводились, поэтому приходится определять  $I$  и  $L_t$  косвенным образом и довольно приблизительно. В [24] предлагается определять величину  $L_t$  с использованием выражения

$$L_t = 0.07D_h,$$

где  $D_h = 4A/P$  – гидравлический диаметр,  $A$  – площадь поперечного сечения потока,  $P$  – периметр [25]. Для рассматриваемой камеры сгорания сечением  $100 \times 65 \text{ мм}^2$  гидравлический диаметр равен  $D_h \approx 79 \text{ мм}$ , а определенная косвенным путем величина  $L_t$  составляет  $\sim 6 \text{ мм}$ . Однако ситуация осложняется наличием в камере перед уступом ячейистой структуры, которая используется для снижения турбулентности. Учитывая этот фактор, в расчетах использовалось приблизительно вдвое меньшее значение  $L_t \approx 3 \text{ мм}$ .

Интенсивность турбулентных пульсаций  $I$  оценена следующим образом. В эксперименте [23] многократно измерялся профиль мгновенной скорости. Обработка этих измерений позволила экспериментаторам получить три профиля: с минимальными и максимальными значениями мгновенной скорости, а также с осредненными значениями скорости. В середине канала разница между максимальным и минимальным значениями скорости составила  $26.6 \text{ м/с}$ . Предположив, что имеет место нормальное распределение скорости, можно воспользоваться приближенным способом определения среднеквадратичного значения пульсации скорости, основанным на правиле “трех сигм”. Согласно этому правилу, среднеквадратичное отклонение некоторой величины от среднего можно определить, разделив максимальное практически возможное отклонение от

среднего на три [26]. Для условий эксперимента [23] получается следующая оценка для среднеквадратичного значения пульсации скорости  $u' \approx 4.4 \text{ м/с}$ . В итоге косвенная оценка интенсивности турбулентных пульсаций дает  $I = u'/U_0 = 0.09$ . Заметим, что при  $I > 0.1$  интенсивность турбулентности считается высокой [24].

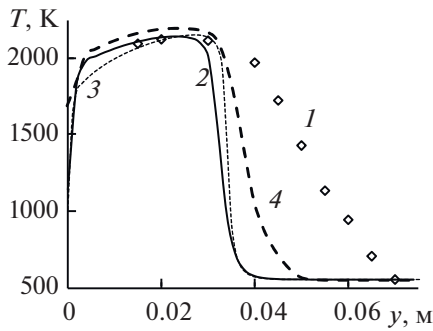
Численное моделирование проводилось с использованием программы Fluent из пакета прикладных программ ANSYS-CFD [24]. Использовались одноблочные сетки с размером ячеек  $2 \times 2$  и  $1 \times 1 \text{ мм}^2$ . Расчеты выполнялись со вторым порядком точности по пространству и времени.

На рис. 4 представлены экспериментальный и расчетные профили температуры в сечении  $x = 250 \text{ мм}$ . Видно, что профили температуры, рассчитанные по квазиламинарному методу на сетках с ячейками  $2$  и  $1 \text{ мм}$ , близки друг к другу, однако фронт горения значительно уже измеренного в эксперименте. При переходе от квазиламинарного метода расчета к модифицированному методу (КЛ-мод) осредненный профиль температуры становится гораздо шире. При этом экспериментальный профиль температуры остается шире расчетного. Причины этого несоответствия, возможно, связаны с: 1) двумерным моделированием трехмерного турбулентного течения; 2) игнорированием пограничного слоя на нижней поверхности канала до уступа при  $x < 0$ ; 3) приближенной оценкой параметров турбулентности потока.

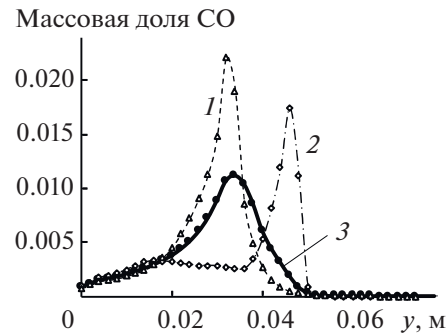
Фронт пламени характеризуется высокой концентрацией CO. На рис. 5 приведены мгновенные (для двух случайно выбранных моментов времени) и осредненный профили концентрации CO в сечении  $x = 250 \text{ мм}$ . Видно, что толщина мгновенного фронта горения составляет  $13\text{--}15 \text{ мм}$  и на него приходится  $6\text{--}7$  расчетных ячеек. Заметим, что при тех же параметрах потока, но в ламинарном случае толщина фронта горения всего лишь  $0.38 \text{ мм}$ . Толщина осредненного фронта горения значительно больше толщины мгновенного фронта.

В связи с тем что ресурсы персонального компьютера не позволяют провести расчет всей рассматриваемой камеры [23], а на ее начальном участке сгорает лишь часть топлива (не более  $15\%$ ), так как фронт горения еще не достиг верхней стенки камеры, то анализ влияния неполноты смешения на эмиссию оксидов азота и углерода проводится для камеры меньшего размера (камера 2). Геометрические размеры камеры  $2$  (см. обозначения на рис. 1):  $h = 4 \text{ мм}$ ,  $H = 10 \text{ мм}$ ,  $L = 100 \text{ мм}$ . Размер расчетных ячеек составлял  $0.5 \times 0.5 \text{ мм}^2$ . Пограничные слои в расчете не учитывались.

Параметры метановоздушной смеси были заимствованы из экспериментальной работы [9]:  $P = 101325 \text{ Па}$ ,  $T_0 = 300 \text{ К}$ ,  $\phi = 0.7$ ,  $U_0 = 3 \text{ м/с}$ . Задавались следующие параметры турбулентности:



**Рис. 4.** Профили температуры в сечении  $x = 250$  мм камеры: 1 – экспериментальные данные [23], 2 – результаты расчета по КЛ-методу с ячейками  $2 \times 2$ , 3 –  $1 \times 1$  мм<sup>2</sup>, 4 – КД-мод-методу с ячейками  $2 \times 2$  мм<sup>2</sup>.



**Рис. 5.** Профили массовой доли СО в сечении  $x = 250$  мм камеры: 1, 2 – мгновенные профили, 3 – осредненный профиль, символы – значения в узлах конечно-разностной сетки.

интенсивность пульсаций скорости  $I = 0.13$ , интегральный масштаб турбулентности  $L_t = 2.4$  мм. При расчете горения частично перемешанной смеси метан–воздух, интегральный масштаб пульсаций мольной доли метана также полагался равным  $L_t(\text{CH}_4) = 2.4$  мм, а интенсивность этих пульсаций  $I(\text{CH}_4)$  варьировалась в пределах от 0% (гомогенная смесь) до 16%.

Важными параметрами камеры сгорания, во многом определяющими ее эмиссионные характеристики (СО, NO<sub>x</sub>), являются: 1) время пребывания газа в камере  $t_p$ ; 2) пологость фронта горения; 3) структура фронта пламени. Рассмотрим эти параметры для камеры 2 подробнее.

Время пребывания газа в камере 2 составляет ~33 мс. Эта величина сопоставима с характерным временем пребывания газа в камерах сгорания газотурбинных установок  $t_p = 25\text{--}85$  мс [27] и в модельной камере 1, исследованной в [23],  $t_p = 19$  мс.

В случае плоского канала положение фронта горения характеризуется углом наклона фронта горения к набегающему потоку свежей смеси  $\alpha$ . Для камеры 1 температура вблизи верхней стенки (при  $y = 90$  мм) резко возрастает между двумя сечениями:  $x = 460$  и  $710$  мм [23]. Это соответствует углу наклона фронта горения  $\alpha = 5.2^\circ\text{--}10^\circ$ . Для камеры 2 наклон фронта горения оценивается с помощью эмпирического соотношения Дамкёлера для турбулентной скорости горения  $U_t$  (см., например, [7]):

$$U_t = U_n + u'.$$

Здесь  $u'$  – среднеквадратичное значение пульсации скорости ( $u' = 0.13U_0$ ),  $U_n$  – скорость ламинарного горения ( $U_n = 0.19$  м/с для рассмотренных параметров смеси). По этой оценке угол наклона фронта горения составляет  $\alpha = 11^\circ$ , т.е. значения углов  $\alpha$  также сопоставимы по величине.

Структура фронта пламени характеризуется двумя величинами: интенсивностью пульсаций

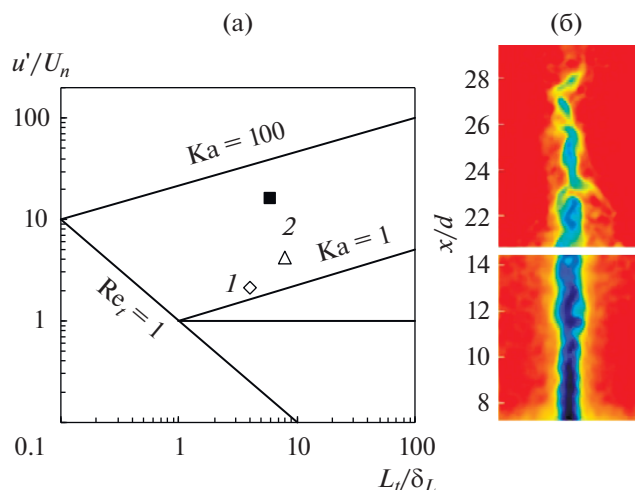
$u'$ , отнесенной к скорости ламинарного горения  $U_n$ , и масштабом турбулентности  $L_t$ , отнесенным к толщине ламинарного фронта горения  $\delta_L$ . Для камеры 1 эти величины имеют следующие значения:  $u'/U_n = 4.4/1.046 = 4.2$  и  $L_t/\delta_L = 3/0.38 = 7.9$ , а для камеры 2:  $u'/U_n = 0.39/0.19 = 2.1$  и  $L_t/\delta_L = 2.4/0.6 = 4$ . На диаграмме режимов горения [28] с осями  $(u'/U_n)$ ,  $(L_t/\delta_L)$  соответствующие точки изображены на рис. 6а.

Видно, что параметры  $u'/U_n$  и  $L_t/\delta_L$  для обеих камер принадлежат одной подобласти диаграммы, ограниченной линиями, которые соответствуют критериям  $Re_t = 1$ ,  $Ka = 1$  и  $Ka = 100$  (рис. 6а), т.е. структура фронта пламени для обеих камер одинакова. Сопоставимость полученных значений  $\alpha$ ,  $t_p$  и структуры пламени позволяет переносить качественные результаты, полученные для камеры 2, на модельную камеру 1 [23].

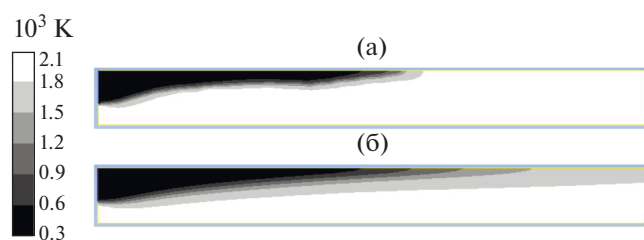
### РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

На рис. 7–9 для камеры 2 приведены мгновенные и осредненные по времени поля температур и массовых долей NO и СО для случая частично перемешанной метановоздушной смеси с  $I(\text{CH}_4) = 0.16$ . Видно, что для каждого из рассмотренных параметров мгновенное поле отличается от осредненного.

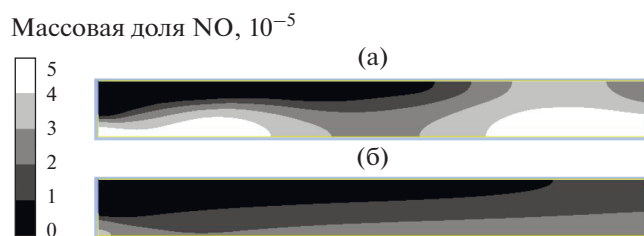
Сравним рассчитанное мгновенное поле температуры (рис. 7а) с мгновенным полем температуры, полученным в эксперименте [28] при турбулентном горении гомогенной метановоздушной смеси (рис. 6б). Режим турбулентного горения, соответствующий этому эксперименту, представлен на рис. 6а квадратным символом и находится в той же подобласти диаграммы, что и режимы камер 1 и 2. Видно качественное соответствие формы фронтов горения на начальном участке течения: фронт горения искривлен и утолщен. Экспериментальный фронт горения искривлен несколько сильнее, чем расчетный, что, возмож-



**Рис. 6.** Диаграмма режимов (а) горения [28]: 1, 2 – режимы горения в камерах 1 и 2 соответственно; (б) мгновенное поле температур, полученное в эксперименте [28] при турбулентном горении гомогенной метановоздушной смеси для режима горения, обозначенного на рис. 6а закрашенным квадратом.



**Рис. 7.** Поля мгновенной (а) и осредненной (б) температуры в камере 2 при горении частично перемешанной метановоздушной смеси с  $I(\text{CH}_4) = 0.16$ .



**Рис. 8.** Поля мгновенной (а) и осредненной (б) массовых долей NO в камере 2 при горении частично перемешанной метановоздушной смеси с  $I(\text{CH}_4) = 0.16$ .

но, объясняется более высоким значением  $u'/U_n$  (см. рис. 6) для этого пламени, а также игнорированием в расчете трехмерных эффектов. Кроме того, введенное здесь понятие мгновенного значения не в полной мере соответствует тому, что мгновенно фиксируется в эксперименте.

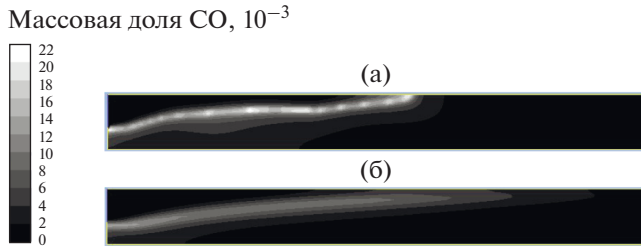
На мгновенном поле концентраций CO (рис. 9а) вдоль фронта горения заметны отдель-

ные локальные области с повышенным уровнем концентрации CO. Отметим, что аналогичные цепочки высокотемпературных пятен, распространяющихся вдоль фронтов горения, были получены при горении турбулентной, но гомогенной метановоздушной смеси при тех же условиях ( $\phi$ ,  $P$ ,  $T_0$ ) [10]. Это обстоятельство трактовалось в [10] как подтверждение высказанного в [29] предположения о том, что распространение пламени в случае критерия Климова–Коважного  $K \ll 1$  ( $K$  характеризует влияние гидродинамических деформаций на внутреннюю структуру пламени и, следовательно, может быть использован для анализа влияния мелкомасштабной части спектра турбулентности на процесс горения) должно определяться некоторыми избранными, так называемыми лидирующими, точками. Анализ расчетных данных настоящей работы (рис. 9а) позволяет ранее сделанное предположение о лидирующих точках распространить с гомогенного случая на случай частично перемешанной смеси.

Количественные различия мгновенных и осредненных параметров удобно проследивать на соответствующих профилях. В качестве примера на рис. 10 представлены мгновенный и осредненный профили концентрации CO вблизи уступа (в сечении  $x = 20$  мм) для случая  $I(\text{CH}_4) = 16\%$ . Видно, что толщина мгновенного фронта горения составляет  $\sim 3$  мм и на него приходится около 6 расчетных ячеек (в ламинарном случае при тех же параметрах потока толщина фронта горения составляет лишь 0.6 мм). Толщина осредненного фронта горения значительно превышает толщину мгновенного фронта. Максимальная мгновенная концентрация CO может превышать максимальную осредненную концентрацию до 2 раз.

Проанализируем влияние неполноты смешения на эмиссию оксидов азота и углерода в выходном сечении камеры сгорания. На рис. 11 представлены осредненные по времени профили концентрации NO. В осевой области ( $y = 0$ ), где температура продуктов сгорания выше (см. рис. 7), концентрация NO выше, чем вблизи стенки. При увеличении неполноты смешения от  $I(\text{CH}_4) = 0$  до  $I(\text{CH}_4) = 16\%$  осредненная по времени концентрация NO увеличивается по всему выходному сечению камеры: как вблизи оси, так и вблизи стенок. Причем зависимость концентрации NO от интенсивности пульсаций концентрации топлива  $I(\text{CH}_4)$  имеет нелинейный характер: чем больше  $I(\text{CH}_4)$ , тем сильнее рост концентрации NO.

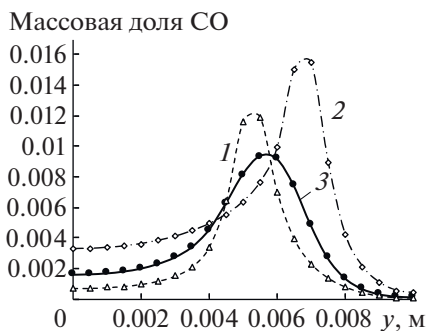
Осредненные по времени и по расходу значения неполноты сгорания  $\sigma$  температуры  $T_{ev}$  и индексов эмиссии NO и CO (EINO, EICO) на выходе из камеры сгорания приведены в таблице. Здесь  $\sigma$  определяется как отношение осредненной по времени и по расходу массовой доли топлива в выходном сечении камеры сгорания к соответствующему значению во входном сечении



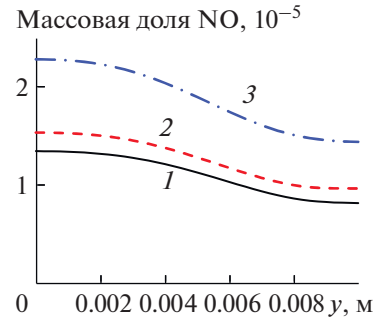
**Рис. 9.** Поля мгновенной (а) и осредненной (б) массовых долей CO в камере 2 при горении частично перемешанной метановоздушной смеси с  $I(\text{CH}_4) = 0.16$ .

камеры. При увеличении  $I(\text{CH}_4)$  от 0 (гомогенная смесь) до 16% (частичное смешение) индекс эмиссии NO увеличился в 1.7 раза, в то время как осредненная температура на выходе даже немного уменьшилась (на 1.4 К). Увеличение эмиссии  $\text{NO}_x$  при ухудшении смешения топлива и воздуха в условиях бедного горения было зарегистрировано экспериментально [1–5, 30]. Например, в [30] увеличение эмиссии  $\text{NO}_x$  составляет ~1.5–1.6 раза при переходе от “почти идеально” к “хорошо” перемешанной смеси при уровне температуры  $T \sim 1830$  К, представляющем интерес, что практически совпадает с полученной авторами расчетной оценкой. К сожалению, в [30] не конкретизировано понятие хорошо перемешанной смеси применительно к неполноте смешения. Интенсивность флуктуации концентрации метана  $I(\text{CH}_4) = 10\%$  в бедной метановоздушной смеси ( $\phi = 0.5$ ) удваивает эмиссию  $\text{NO}_x$  [3]. Уровень флуктуации топлива в 15% увеличивает эмиссию  $\text{NO}_x$  при горении смеси  $\text{C}_3\text{H}_8$ –воздух ( $\phi = 0.5$ ) в 2–2.5 раз, а при  $I \sim 30\%$  – более чем на порядок [5].

Неполнота сгорания  $\sigma$  при увеличении  $I(\text{CH}_4)$  от 0 до 16% увеличивается от незначительной величины 0.017% до достаточно большого значения 0.43%, т.е. более чем на порядок (таблица).



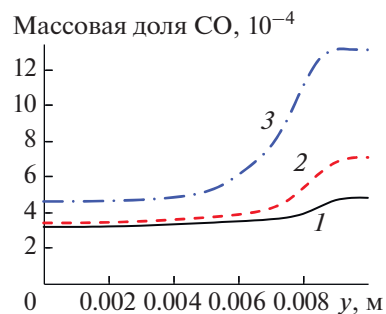
**Рис. 10.** Профили массовой доли CO в сечении  $x = 20$  мм камеры 2: 1, 2 – мгновенные профили; 3 – осредненный профиль; символы – значения в узлах конечно-разностной сетки.



**Рис. 11.** Профили осредненной массовой доли NO в выходном сечении камеры 2 при  $I(\text{CH}_4) = 0$  (1), 8 (2) и 16% (3).

На рис. 12 представлены профили осредненной по времени массовой доли CO в выходном сечении камеры 2. Видно, что при увеличении неполноты смешения осредненная концентрация CO в выходном сечении камеры увеличивается, причем особенно сильно вблизи стенки камеры. Так же как для NO, рост концентрации CO ускоряется с увеличением интенсивности пульсаций концентрации топлива  $I(\text{CH}_4)$ . Чтобы прояснить ситуацию, рассмотрим распределения концентрации CO вдоль верхней стенки камеры (рис. 13а), куда приходит фронт горения.

Видно, что с увеличением неполноты смешения область с высокой концентрацией CO у верхней стенки расширяется в сторону выходного сечения камеры. В результате осредненная концентрация CO у верхней стенки вблизи выхода из камеры ( $x > 0.08$  м) увеличивается с ростом  $I(\text{CH}_4)$ . Чтобы уменьшить концентрацию CO в этой области за счет доокисления CO до  $\text{CO}_2$  в случае не полностью перемешанной смеси, камеру необходимо удлинять. Распределения концентрации окиси углерода вдоль нижней стенки камеры не имеют таких особенностей (рис. 13б). С увеличением неполноты смешения наблюдается



**Рис. 12.** Профили осредненной массовой доли CO в выходном сечении камеры 2 при  $I(\text{CH}_4) = 0$  (1), 8 (2) и 16% (3).

Осредненные значения неполноты сгорания  $\sigma$ , температуры  $T_{ev}$  и индексов эмиссии EINO и EICO в выходном сечении камеры 2 при различной интенсивности пульсаций концентрации топлива  $I(\text{CH}_4)$

$I(\text{CH}_4)$ , %	0	8	16
$\sigma$ , %	0.017	0.063	0.43
$T_{ev}$ , K	1837.2	1834.7	1835.8
EINO	0.285	0.328	0.488
EICO	9.24	10.95	17.78

лишь незначительный подъем осредненной по времени концентрации CO вдоль нижней стенки.

Из приведенных в таблице данных видно, что с увеличением неполноты смешения от  $I(\text{CH}_4) = 0$  до 16% индекс эмиссии CO увеличивается в 1.9 раза, что даже несколько превышает степень роста индекса эмиссии оксида азота (эмиссия NO увеличилась в 1.7 раза). Таким образом, неполнота смешения при горении бедной метановоздушной смеси с температурой продуктов сгорания  $\sim 1830$  K приводит не только к росту эмиссии NO, но и к сопоставимому по величине увеличению эмиссии CO.

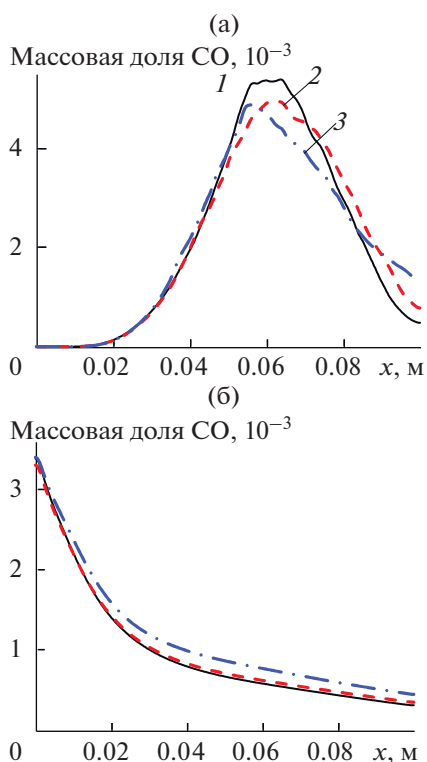


Рис. 13. Распределения осредненной массовой доли CO вдоль верхней (а) и нижней (б) стенок камеры 2 при  $I(\text{CH}_4) = 0$  (1), 8 (2) и 16% (3).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнено численное исследование влияния неполноты смешения на эмиссию оксидов азота и углерода при горении бедной метановоздушной смеси ( $\phi = 0.7$ ) в модельной камере сгорания, представляющей собой канал прямоугольного сечения с обратным уступом. Неполнота смешения моделировалась заданием нестационарного профиля концентрации топлива на входе в камеру. Расчет выполнен с использованием нового редуцированного кинетического механизма окисления метана, который содержит реакции с участием 28 реагирующих компонентов, в том числе пяти N-содержащих компонентов: N, N<sub>2</sub>, NO, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O. Механизм включает термический и N<sub>2</sub>O-механизм образования NO. Проведено тестирование механизма на экспериментальных данных по времени воспламенения, скорости ламинарного пламени, а также профилям температуры и концентрации компонентов при горении метановоздушной смеси в бунзеновской горелке. Тестирование методики расчета для плоской камеры сгорания с обратным уступом показало удовлетворительное согласие рассчитанного профиля температуры с измеренным в эксперименте.

Результаты вариационных расчетов показали, что неполнота смешения топлива (метана) с воздухом приводит к увеличению эмиссии не только окиси азота, но и окиси углерода. Причем зависимости концентрации NO и CO от интенсивности пульсаций концентрации топлива  $I(\text{CH}_4)$  имеют нелинейный, нарастающий характер. Увеличение  $I(\text{CH}_4)$  от 0 до 16% приводит к увеличению индекса эмиссии NO в  $\sim 1.7$  раза, а индекса эмиссии CO в  $\sim 1.9$  раза, т.е. влияние неполноты смешения на эмиссию окиси углерода оказалось столь же значительным, как и на эмиссию окиси азота. Анализ показал, что рост эмиссии CO обусловлен расширением области взаимодействия фронта горения и верхней стенки в направлении выходного сечения камеры. В результате CO не успевает доокислиться до CO<sub>2</sub>, и для уменьшения его концентрации в случае неполного смешения топлива с воздухом требуется удлинить камеру.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 17-08-01423).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lyons V.J. Fuel/Air Nonuniformity – Effect on Nitric Oxide Emissions // AIAA J. 1981. V. 20. № 5. P. 650.
2. Maughan J.R., Warren Jr. R.E., Tolpadi A.K., Roloff T.P. Effect of Initial Fuel Distribution and Subsequent Mixing on Emissions from Lean, Premixed Flames // ASME Paper № 92-GT121. 1992.
3. Fric T.F. Effect of Fuel-air Unmixedness on NO<sub>x</sub> Emissions // AIAA Paper № 92-3345. 1992.



4. *Shih W.-P., Lee J.G., Santavicca D.A.* Stability and Emissions Characteristics of a Lean Premixed Gas Turbine Combustor // Proc. 26th Int. Symposium on Combustion. Pittsburgh, PA: The Combustion Institute, 1996. P. 2771.
5. *Boehman A.L., Dibble R.W.* Experimental and Numerical Investigation on the Influence of Temporal Fuel/Air Unmixedness on NO<sub>x</sub> Emissions of Lean Premixed Catalytically Stabilized and Non-catalytic Combustion // Catal. Today. 2000. V. 59. P. 131.
6. *Grinstein F.F., Kailasanath K.K.* Three-dimensional Numerical Simulations of Unsteady Reactive Square Jets // Combust. Flame. 1995. V. 100. № 1–2. P. 2.
7. *Козлов В.Е., Лебедев А.Б., Секундов А.Н., Якубовский К.Я.* Моделирование скорости турбулентного гомогенного горения на основе “квазиламинарного” подхода // ТВТ. 2009. Т. 47. № 6. С. 946.
8. *Козлов В.Е., Лебедев А.Б., Секундов А.Н., Якубовский К.Я.* Эмиссия оксидов углерода при сжигании бедных заранее перемешанных метановоздушных смесей // Химическая физика. 2010. Т. 29. № 7. С. 37.
9. *Bell J.B., Day M.S., Shepherd I.G. et al.* Numerical Simulation of a Laboratory-scale Turbulent V-flame // Proc. National Academy of Science USA. 2005. V. 102. № 29. P. 10006.
10. *Козлов В.Е.* Расчетное исследование влияния турбулентности набегающего потока на V-образное горение однородной метановоздушной смеси // ТВТ. 2012. Т. 50. № 4. С. 538.
11. *Козлов В.Е., Титова Н.С.* Двумерное моделирование V-образного турбулентного горения метановоздушной смеси // ТВТ. 2019. Т. 57. № 1. С. 106.
12. *Ведешкин С.К., Свердлов Е.Д.* Организация низкоэмиссионного сжигания газа в газотурбинных установках // Теплоэнергетика. 2005. № 11. С. 10.
13. *Bowman C.T., Hanson R.K., Davidson D.F., Gardiner W.C., Lissianski V., Smith G.P., Golden D.M., Frenklash M., Goldenberg M.* What's New in GRI-Mech 3.0. <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html>
14. *Starik A.M., Kozlov V.E., Titova N.S.* On the Influence of Singlet Oxygen Molecules on the Speed of Flame Propagation in Methane-air Mixture // Combust. Flame. 2010. V. 157. P. 313.
15. *Zhang Y., Huang Z., Wei L., Zhang J., Law C.K.* Experimental and Modeling Study on Ignition Delays of Lean Mixtures of Methane, Hydrogen, Oxygen, and Argon at Elevated Pressures // Combust. Flame. 2012. V. 159. P. 918.
16. *Yu G., Law C.K., Wu C.K.* Laminar Flame Speeds of Hydrocarbon-air Mixtures with Hydrogen Addition // Combust. Flame. 1986. V. 63. P. 339.
17. *Tanoue K., Goto S., Shimada F., Hamatake T.* Effects of Hydrogen Addition on Stretched Premixed Laminar Methane Flames: 1st Report, Effects on Laminar Burning Velocity // Trans. Jpn. Soc. Mech. Eng. B. 2003. V. 69. P. 162.
18. *Huang Z., Zhang Y., Zeng K., Liu B., Wang Q., Jiang D.* Measurements of Laminar Burning Velocities for Natural Gas-hydrogen-air Mixtures // Combust. Flame. 2006. V. 146. P. 302.
19. *Nguyen Q.V., Dibble R.W., Carter C.D., Fiechtner G.J., Barlow R.S.* Raman-LIF Measurements of Temperature, Major Species, OH and NO in a Methane-air Bunzen Flame // Combust. Flame. 1996. V. 105. P. 499.
20. *Козлов В.Е., Старик А.М., Титова Н.С., Ведищев И.Ю.* О механизмах образования экологически опасных соединений в гомогенных камерах сгорания // Физика горения и взрыва. 2013. Т. 49. № 5. С. 17.
21. *Starik A.M., Kozlov V.E., Titova N.S.* On the Influence of Singlet Oxygen Molecules on Characteristics of HC-CI Combustion: A Numerical Study // Combust. Theory. Model. 2013. V. 17. № 4. P. 579.
22. *Glarborg P., Miller J.A., Ruscic B., Klippenstein S.J.* Modeling Nitrogen Chemistry in Combustion // Prog. Energy Combust. Sci. 2018. V. 67. P. 31.
23. *Vincent A., Sabelnikov V., Dupoirieux F., Habiballah M.* CIAM-ONERA Cooperation in the Field of Combustion in Gas Turbine Engines. ONERA's Experimental Combustion Database – Backward Facing Step Stabilized Premixed Flame in High-turbulence Flow. The French Aerospace Lab, November 18, 2015.
24. ANSYS FLUENT Theory Guide. Release 14.5. ANSYS Inc. Oct. 2012.
25. *Идельчик И.Е.* Справочник по гидравлическим сопротивлениям / Под ред. Штейнберга М.О. М.: Машиностроение, 1992. 672 с.
26. *Вентцель Е.С.* Теория вероятностей. М.: Наука, 1969. С. 125.
27. *Свердлов Е.Д.* Разработка концепции рабочего процесса в низкоэмиссионной камере сгорания газотурбинной установки на природном газе. В кн.: Экологические проблемы авиации / Под ред. Халецкого Ю.Д. М.: Торус пресс, 2010. С. 451.
28. *Zhou B., Brackmann C., Wang Z., Li Z., Richter M., Aldén M., Bai X.-S.* Thin Reaction Zone and Distributed Reaction Zone Regimes in Turbulent Premixed Methane/Air Flames: Scalar Distributions and Correlations // Combust. Flame. 2017. V. 175. P. 220.
29. *Кузнецов В.Р., Сабельников В.А.* Турбулентность и горение. М.: Наука, 1986. 288 с.
30. *Leonard G., Stegmaier J.* Development of an Aeroderivative Gas Turbine Dry Low Emissions Combustion System // Transactions of the ASME. 1994. V. 116. P. 542.