

В работе показано влияние концентрации угольных частиц и скорости подачи смеси на устойчивость функционирования горелки, работающей на 2% об. метано-воздушной смеси.

Результаты расчетов показывают, что температура в зоне реакции слабо зависит от размеров угольных частиц, изменяющихся в диапазоне от 1 до 10 мкм.

Зона тепловыделения в результате химических реакций сдвигается к центру горелки при увеличении скорости подачи смеси (рис. 1). Дальнейшее увеличение скорости подачи смеси ведет к выносу зоны реакции из горелки.

Увеличение скорости подачи смеси ведет к снижению температуры продуктов сгорания на выходе из горелки (рис. 2, а). При достижении скорости подачи смеси близкой к предельной максимальная температура резко снижается (рис. 2, б).

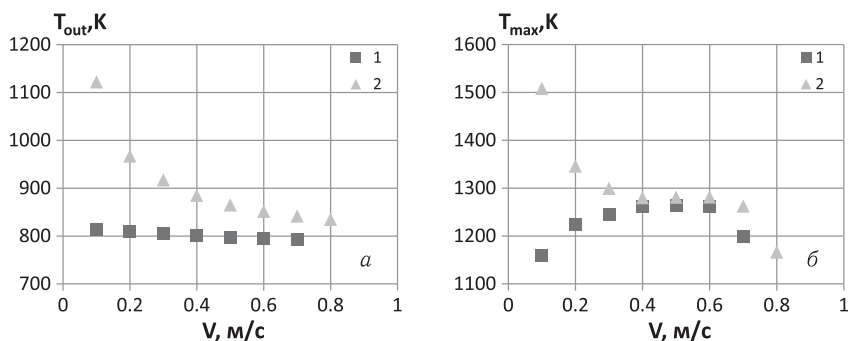


Рис. 2. Температура продуктов сгорания: а — на выходе из горелки; б — максимальная температура в горелке; 1 — $\rho_s = 0,167 \text{ г/м}^3$; 2 — $\rho_s = 16,67 \text{ г/м}^3$

Увеличение содержания угольных частиц расширяет диапазон устойчивой работы горелки и ведет к тому, что зона реакции перемещается к входной части горелки (рис. 1, б), а тепловыделение в горелке возрастает, приводя к увеличению максимальной температуры и, как следствие, к увеличению температуры на выходе из горелки (рис. 2).

Повышение концентрации угольных частиц меняет характер поведения зависимости максимальной температуры продуктов от скорости подачи смеси. При незначительных концентрациях ($0,167\text{--}1,67 \text{ г/м}^3$) максимальная температура с ростом скорости подачи смеси сначала возрастает, а затем падает, достигая максимума при $V = 0,5 \text{ м/с}$. Для концентраций $16,7 \text{ г/м}^3$ и выше максимальная температура монотонно падает с ростом скорости подачи смеси.

УЧЕТ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ ПРОДУКТА В МОДЕЛЯХ КОЭФФИЦИЕНТОВ СКОРОСТИ ОБМЕННЫХ РЕАКЦИЙ*

А. С. Савельев, Е. В. Кустова

СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

Поуровневая колебательно-химическая кинетика широко используется в современной высокотемпературной и высокоэнтальпийной газодинамике для моделирования сильнонеравновесных течений. Изначально она использовалась в основном для одномерных невязких потоков и простых двумерных течений. Основной причи-

* Работа выполнена при поддержке РФФИ №18-01-00493.

ной служили высокая вычислительная сложность и отсутствие моделей для коэффициентов скорости реакций и переноса. Увеличение производительности вычислительных инструментов позволило применить поуровневые модели для исследования кинетики более сложных смесей [1, 2]. В это же время была разработана кинетическая теория переноса для поуровневого приближения, существенно увеличивает возможности ее использования.

Точность газодинамических параметров, определяемых поуровневым описанием, существенно зависит от точности коэффициентов скорости энергетических переходов и химических реакций. Экспериментальное измерение термически неравновесных коэффициентов скорости диссоциации затруднительно. С другой стороны, молекулярная динамика является мощным инструментом для расчета поуровневых коэффициентов скорости реакций, однако ее непосредственное применение в вычислительной газодинамике не представляется возможным. Приближенные формулы, полученные на основе квазиклассических траекторных расчетов (QCT), имеют хорошую точность только в ограниченном диапазоне температур и колебательных состояний. Поэтому существует потребность в надежных, точных и легко реализуемых моделях коэффициентов скоростей реакций.

В предшествующих работах авторов были детально изучены поуровневые коэффициенты скорости диссоциации, предложена модификация широко известной модели Тринора–Маррона, позволяющая обеспечить хорошее согласование теоретических расчетов с квазиклассическими траекторными данными.

Скорости обменных химических реакций имеют решающее значение для точного описания динамики неравновесных течений и теплопередачи. В колебательно-неравновесных течениях необходимо учитывать сильную связь колебательной релаксации и химических реакций, при этом одностепенные коэффициенты скорости реакций в форме закона Аррениуса неприменимы. При этом усредненные коэффициенты скорости реакции сильно зависят от формы неравновесных распределений. Модель, разработанная в [3], преодолевает эти ограничения, однако полученные в этой статье выражения имеют довольно сложную форму, и их трудно реализовать непосредственно в трехмерных расчетах вязких течений. Для практических расчетов представляют интерес более простые модели.

В настоящей работе рассматриваются реакции Зельдовича:



Основываясь на методологии, разработанной в работах [3–6], мы ранжировали существующие теоретические модели, взяв за основу степень согласованности результатов вычислений по этим моделям с данными квазиклассических траекторных расчетов. В результате такого сопоставления наилучшие результаты были получены для модели Алиата [7] во всем диапазоне температур и колебательных состояний реагента. Но у этой модели все еще остается существенный недостаток: она позволяет рассчитать коэффициенты скорости обменной реакции только для 0-го колебательного уровня молекулы NO, в то время как квазиклассические траекторные расчеты представляют данные для всех колебательных состояний продукта. Основываясь на этих данных и модели Алиата, была получена обобщенная модель Тринора–Маррона, учитывающая колебательное состояние продукта реакции:

$$k_{M_2(i),NO(k)}^{\text{exch}}(T, U) = \begin{cases} C_k(T, U) k_{\text{eq},k}^{\text{exch}} \exp\left(-\frac{E_{a,k}}{kU}\right) \exp\left[\frac{\varepsilon_i^{M_2}}{k}\left(\frac{1}{T} + \frac{1}{U}\right)\right], & \varepsilon_i^{M_2} < E_{a,k}, \\ C_k(T, U) k_{\text{eq},k}^{\text{exch}} \exp\left(\frac{E_{a,k}}{kT}\right), & \varepsilon_i^{M_2} > E_{a,k}, \end{cases} \quad (3)$$

$$C_k(T, U) = Z_{M_2}^{\text{vibr}}(T) \left[\sum_{i=0}^{i^*} \exp\left(-\frac{E_{a,k} - \varepsilon_i^{M_2}}{kU}\right) + \sum_{i^*+1}^{l_c} \exp\left(\frac{E_{a,k} - \varepsilon_i^{M_2}}{kT}\right) \right]^{-1}, \quad (4)$$

$$k_{\text{eq},k}^{\text{exch}} = AP_k T^b \exp\left(-\frac{E_{a,k}}{kT}\right). \quad (5)$$

Здесь M_2 символизирует N_2 или O_2 из (1) и (2) соответственно, $E_{a,k}$ — модернизированная энергия активации, P_k — корректирующая функция для коэффициента A , зависящая от колебательного уровня молекулы NO , $\varepsilon_i^{M_2}$ — величина колебательной энергии соответствующего колебательного уровня молекулы M_2 . Рекомендованные значения параметров представлены в работе [8].

Следующим этапом стало изучение учета колебательного состояния продукта на многотемпературные коэффициенты скорости обменных реакций. Для этого соответствующие поуровневые коэффициенты осреднялись с использованием распределения Больцмана по колебательным состояниям реагента. Таким образом, были получены многотемпературные коэффициенты для каждого колебательного уровня NO . Для получения полного коэффициента скорости реакции данные коэффициенты суммировались по всем колебательным состояниям продукта реакции. Данные, полученные в результате осреднения, сравнивались между собой и с другими теоретическими моделями двухтемпературных коэффициентов скорости обменных реакций.

1. *Kunova O., Nagnibeda E.* State-to-state description of reacting air flows behind shock waves // Chem. Phys. — 2014. — V. 441. — P. 66–76.
2. *Armenise I., Kustova E.* State-to-State Models for CO_2 Molecules: from the Theory to an Application to Hypersonic Boundary Layers // Chem. Phys. — 2013. — V. 415. — P. 269–281.
3. *Kustova E., Oblapenko G.* Reaction and internal energy relaxation rates in viscous thermochemically non-equilibrium gas flows // Phys. Fluids. — 2015. — V. 27. — P. 016102.
4. *Савельев А. С., Кустова Е. В.* Пределы применимости модели Тринора–Маррона для поуровневых коэффициентов скорости диссоциации N_2 и O_2 // Вестник Санкт-Петерб. ун-та. Серия 1: Математика, Механика, Астрономия. — 2015. — Т. 2, № 60. — P. 268–279.
5. *Kustova E., Nagnibeda E., Oblapenko G., Savelev A., Sharafutdinov I.* Advanced models for vibrational-chemical coupling in multi-temperature flows // Chem. Phys. — 2016. — V. 464. — P. 1–13.
6. *Kunova O., Kustova E., Savelev A.* Generalized Treanor–Marrone model for state-specific dissociation rate coefficients // Chem. Phys. Lett. — 2016. — V. 659. — P. 80–87.
7. *Aliat A.* State-to-state dissociation–recombination and chemical exchange rate coefficients in excited diatomic gas flows // Physica A. — 2008. — V. 387. — P. 4163–4182.
8. *Kustova E. V., Savelev A. S., Kunova O. V.* Rate coefficients of exchange reactions accounting for vibrational excitation of reagents and products // In proceeding.

ВЛИЯНИЕ ПОТОКА ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ГАЗА НА ЗАЖИГАНИЕ ЧАСТИЦ ВОДОУГОЛЬНОГО ТОПЛИВА

В. В. Саломатов¹, Г. В. Кузнецов², С. В. Сыродой²

¹ИТ СО РАН, Новосибирск, Россия; ²ТПУ, Томск, Россия

Перспективность использования технологий водоугольного топлива обоснована достаточно давно [1]. Но при этом можно отметить, что ВУТ используется, как правило, в качестве сырья для производства синтез-газа. Энергетических уста-