

Козин Ф.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт

### **Особенности применения численных методов для моделирования процессов горения.**

При моделировании горения высокотемпературных потоков газа с частицами приходится учитывать массу физических особенностей, основную сложность среди которых представляют следующие:

- Двухфазность потока
- Многокомпонентность газовой струи
- Турбулентность потока

Двухфазность струи реализована путем моделирования потока многокомпонентного газа и псевдогаза частиц, а также различными механизмами связи между ними.

Для описания химических реакций в многокомпонентных газовых потоках в настоящий момент чаще всего используются системы уравнений химической кинетики, представляющие собой системы жестких нелинейных дифференциальных уравнений. Численное решение и его устойчивость является отдельной проблемой.

При расчете горения гетерогенной среды (газа и частиц) используются различной степени сложности приближенные методы, но, к сожалению, коэффициенты химических реакций для гетерогенных сред экспериментально измерены в очень небольшом диапазоне размеров частиц, и при расчетах за его пределами приводят к нереалистичным результатам.

Существенный вклад в горение вносит турбулентность потока, но реализация достаточно сложной модели турбулентности для горения двухфазного многокомпонентного потока требует слишком больших вычислительных ресурсов, поэтому, как правило, учет турбулентности в процессе горения существенно упрощают без заметных потерь для результата расчетов горения.

Для решения подобных проблем существует множество подходов [1], но большинство из них не являются универсальными. Особенно хорошо это проявляется в неустойчивости решения систем дифференциальных уравнений для гетерогенных реакций при существенном изменении начального размера твердых частиц.

В настоящий момент существует значительное число измеренных коэффициентов химических реакций, опубликованные данные по которым собраны в единые сетевые базы данных. Это существенно облегчает поиск начальных параметров для моделирования горения, но, при этом, вызывает значительную неоднозначность в выборе конкретных коэффициентов. Сложную систему горения при моделировании можно разложить на различное число составляющих её элементарных реакций, и от выбора разложения зависит результат моделирования. В настоящий момент одним из оптимальных методов выбора системы дифференциальных уравнений для конкретного случая является метод редуцирования предельно полной системы элементарных реакций, со всеми представленными путями реакции, до минимального числа уравнений при сохранении заданной точности [2].

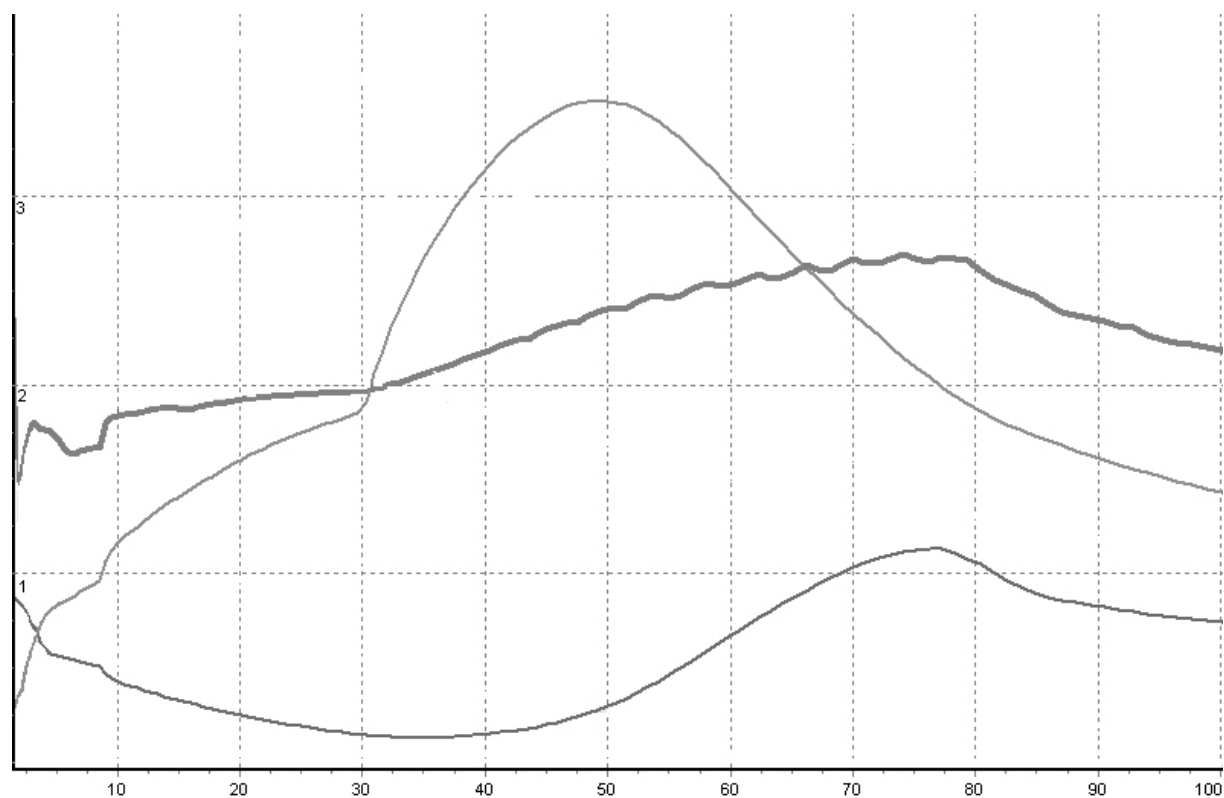


Рис. 1. Продольная зависимость параметров от расстояния по оси пламени для минимальной системы реакций [1]. Толстая линия – температура, Тонкие – концентрации продуктов сгорания (углекислый газ и пары воды).

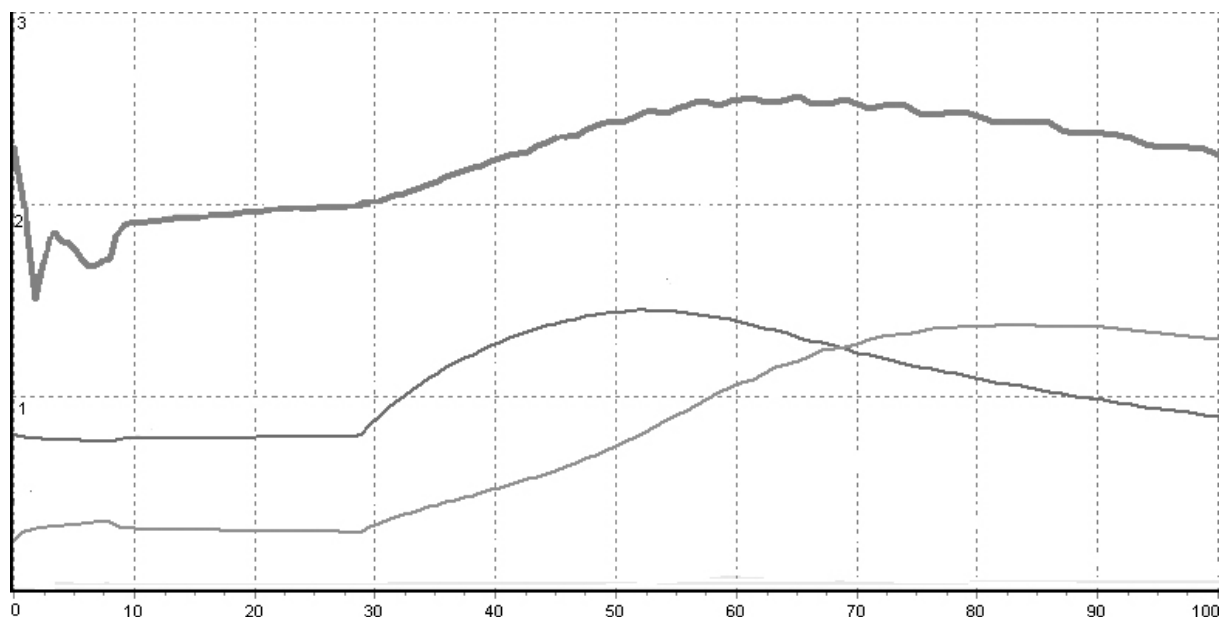


Рис. 2. Продольная зависимость параметров от расстояния по оси пламени для минимальной системы реакций [3]. Толстая линия – температура, Тонкие – концентрации продуктов сгорания (углекислый газ и пары воды).

Различие в результатах расчета горения водородно-углеродной смеси в атмосфере для различных наборов реакций и различных коэффициентов можно наблюдать на рис. 1 и рис. 2. Во втором случае горение идет существенно медленнее.

Таким образом, при моделировании процессов горения приходится учитывать массу особенностей как численных методов решения дифференциальных уравнений, так и существующих экспериментальных данных. К сожалению, в настоящий момент нет критериев, которые могли бы определить, какая из минимальных систем больше подходит под конкретную задачу, кроме как сравнение с экспериментальными данными.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Turns Stephen R.* An introduction to combustion — McGraw-hill, 2000.
2. *Androulakis Ioannis P.* Kinetic Mechanism Reduction Based on an Integer Programming Approach // *AICHE Journal*. — 2000. — V.46, N.2. — P. 361-371.
3. *К.Б.Галицкий* Моделирование догорания высокоскоростных турбулентных струй. // *Физика горения и взрыва*. —2006. Т.2, Ч.2 — С. 3-9.