

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАВНОВЕСНОГО СГОРАНИЯ КЕРОСИНА СМЕСЬЮ ГАЗООБРАЗНЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ

В. А. Левин¹, Г. Д. Смехов², А. Н. Хмелевский²

¹Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН, 690041 Владивосток

²Институт механики Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, 119192 Москва
smekhov@imec.msu.ru

Показана возможность моделирования состава и параметров состояния газа, образующегося в результате равновесного сгорания авиационного керосина в воздухе, путем определения тех же величин для определенной смеси углеводородных горючих. В качестве таковой может быть смесь равных количеств метана и ацетилена. Рассчитанный равновесный состав для модельной смеси в точности совпадает с составом продуктов сгорания керосина при одинаковых значениях давления (или плотности), температуры и коэффициента избытка окислителя. При сгорании керосина и модельной смеси в режиме с постоянным давлением (или плотностью) можно обеспечить удовлетворительное совпадение температур конечных продуктов и их составов, если в качестве окислителя для смеси использовать обедненный кислородом воздух.

Ключевые слова: авиационный керосин, равновесное сгорание, моделирование, метан, ацетилен.

Керосин является основным топливом, используемым в авиации. На первой стадии горения керосин переходит из жидкого состояния в газообразное и далее происходит окончательное сгорание с образованием конечных продуктов. При экспериментальных исследованиях новых типов реактивных двигателей, по существу, нет необходимости в воспроизведении первой стадии сгорания керосина, если конечный состав газа в камере сгорания равновесный. Для отработки рабочего процесса двигателя можно использовать модельную смесь газообразных горючих, при сгорании которой образуется газ такого же состава и с такими же параметрами, как и при сгорании керосина в воздухе. Если моделирование осуществить достаточно точно, то использование такой смеси будет иметь и определенные преимущества, поскольку в этом случае отсутствует влияние на результаты исследований неопределенностей, связанных с наличием первой стадии горения керосина.

В работе показано, что обсуждаемое моделирование равновесного сгорания керосина действительно можно осуществить. Предложены конкретные составы модельных смесей, эквивалентных керосину в газовой фазе, и приведены результаты расчетов, демонстрирующие соот-

ветствие компонентных составов и параметров равновесного сгорания модельных смесей и керосина.

1. МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОНЕНТНОГО СОСТАВА ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ КЕРОСИНА

Керосин представляет собой смесь углеводородов различного типа и состава, в которой полное число атомов водорода превышает число атомов углерода в 1.956 раза и значение низшей теплоты сгорания составляет $\Delta H = 4.30952 \cdot 10^4$ кДж/кг при стандартной температуре $T = 298.15$ К [1]. Количество атомов углерода в молекулах углеводородов смеси изменяется в пределах $10 \div 14$ [2]. Таким образом, условной молекулой керосина можно считать молекулу $C_{12}H_{24}$ с энтальпией образования $H_f^0(298.15 \text{ К}) = -3.83894 \times 10^2$ кДж/моль. Предполагается, что окислителем является стандартный воздух и в результате сгорания образуется газ в термически и химически равновесном состоянии.

Моделирование керосина смесью других газообразных горючих возможно в силу того обстоятельства, что равновесный состав любого газа при заданных значениях температуры T и плотности ρ или температуры T и давления p зависит лишь от общего числа атомов элементов в начальной смеси. Это следует из закона сохранения элементного состава

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 05-08-33391а, 05-01-00004).

химически реагирующей газофазной системы и закона действующих масс, лежащего в основе определения компонентного состава газа. Если подобрать смесь углеводородных горючих, создающих в единице массы топливной смеси такое же количество атомов углерода и водорода, какое создается в горючей смеси керосина и окислителя, то такие топливные смеси при одинаковых значениях указанных параметров в состоянии равновесия будут иметь одинаковый компонентный состав.

Нетрудно видеть, что смесь, состоящая из равных количеств предельного углеводорода C_nH_{2n+2} и ацетилена C_2H_2 , может моделировать керосин, так как в такой смеси отношение чисел атомов Н и С равно их отношению в условной молекуле керосина ($H/C = 2$), и поэтому в топливной смеси можно подобрать такое значение относительной молярной концентрации модельного горючего X_m , при котором число атомов элементов каждого сорта в единице массы будет равно числу соответствующих атомов в топливной керосиновой смеси с концентрацией газообразного керосина X_k . Простейшей модельной смесью горючего этого типа является смесь метана и ацетилена — $0.5X_m(CH_4) + 0.5X_m(C_2H_2)$. Можно показать, что эквивалентные концентрации X_m и X_k в ней связаны соотношением

$$X_m = 8X_k / (1 + 7X_k). \quad (1)$$

Однако применять эту формулу и подобные ей для других углеводородов нет необходимости, если рассчитывать начальные концентрации горючих с помощью коэффициентов избытка окислителя. Поскольку эквивалентные концентрации керосина и модельного горючего обеспечивают одинаковое количество элементов в единице массы топлива, значения коэффициентов избытка окислителей для эквивалентных концентраций одинаковы: $\alpha_m = \alpha_k = \alpha$.

Расчеты параметров и состава газа, образующегося при сгорании различных топливных смесей, были проведены с использованием программной системы «Мираж», предназначенной для численного моделирования равновесного и неравновесного состояний многокомпонентной реагирующей газофазной среды [3]. Для вычисления равновесного состава применялся модернизированный алгоритм, описанный в [4]. Программная система была дополнена новыми блоками для решения задач, поставленных в настоящей работе.

Основной процедурой определения состава газа в равновесном состоянии может быть расчет при заданных значениях температуры и давления либо температуры и плотности; по ряду соображений в указанной программной системе используется последняя. Применение этой процедуры к расчету составов продуктов горения модельного горючего и керосина в режиме $T = \text{const}$, $p = \text{const}$ в воздухе приводит к тождественным уравнениям и коэффициентам уравнений, что, естественно, обеспечивает идентичный состав этих продуктов. Поэтому в качестве иллюстраций приведены результаты расчетов горения топлив в режиме $T = \text{const}$, $p = \text{const}$. Для горения керосина в этом режиме имеются справочные данные [1], которые можно использовать для контроля результатов расчетов.

Расчеты проведены при $p = 0.2$ МПа, начальной температуре горючей смеси $T_0 = 298.15$ К и коэффициенте избытка окислителя $\alpha = 1; 0.8; 1.2$. Результаты вычислений представлены в табл. 1–3. Во всех таблицах варианты 1 — данные из справочника [1] по горению авиационного керосина в стандартном воздухе при заданном давлении и коэффициенте избытка окислителя в камере сгорания. Вариант 2 — результаты расчета для керосина с условной формулой $C_{12}H_{24}$ при заданном давлении и температуре, соответствующей данным [1]. Вариант 3 — аналогичные данные для модельного горючего при $T = \text{const}$, $p = \text{const}$.

Анализ полученных результатов позволяет сделать следующие выводы. Выбранная формула условной молекулы керосина правильно отражает свойства авиационного керосина, рассматриваемого в [1] (ср. варианты 1 и 2). Двухкомпонентное горючее, состоящее из равных количеств метана и ацетилена, полностью идентично газообразному керосину $C_{12}H_{24}$ при его сгорании в условиях $T = \text{const}$, $p = \text{const}$. Состав продуктов сгорания модельного горючего в точности совпадает с составом продуктов сгорания керосина при одинаковых давлениях, температурах и коэффициентах избытка окислителя. Расчеты, проведенные для других значений давлений и коэффициента избытка окислителя, также соответствуют этим выводам.

Эта серия расчетов подтверждает сделанное выше утверждение о возможности точного моделирования равновесного состава керосиновоздушного топлива путем замены кероси-

Таблица 1

| Вариант | T, К | M | $r_i \cdot 10^2$ | | | | | | | | | |
|---|-------|-------|------------------|------|----------------|----------------|----------------|------|------------------|------|-----------------|------|
| | | | H | O | H ₂ | N ₂ | O ₂ | OH | H ₂ O | CO | CO ₂ | NO |
| 1. Керосин [1] | 2 287 | 28.71 | 0.03 | 0.02 | 0.23 | 72.28 | 0.54 | 0.27 | 12.42 | 1.23 | 11.89 | 0.24 |
| 2. Керосин ($T = \text{const}$, $p = \text{const}$) | 2 287 | 28.66 | 0.03 | 0.02 | 0.22 | 72.30 | 0.52 | 0.26 | 12.57 | 1.20 | 11.74 | 0.23 |
| 3. Модельное горючее ($T = \text{const}$, $p = \text{const}$) | 2 287 | 28.66 | 0.03 | 0.02 | 0.22 | 72.30 | 0.52 | 0.26 | 12.57 | 1.21 | 11.73 | 0.24 |
| 4. Керосин | 2 284 | 28.66 | 0.03 | 0.02 | 0.22 | 72.31 | 0.51 | 0.25 | 12.58 | 1.19 | 11.75 | 0.23 |
| 5. Модельное топливо 1 ($\beta = 0$) | 2 446 | 28.47 | 0.09 | 0.07 | 0.39 | 71.71 | 0.90 | 0.51 | 12.15 | 2.15 | 10.69 | 0.43 |
| 6. Модельное топливо 2 ($\beta = 0.17$) | 2 284 | 28.57 | 0.03 | 0.02 | 0.20 | 76.04 | 0.46 | 0.23 | 10.85 | 1.08 | 10.10 | 0.22 |

Примечание. $\alpha = 1$, $p = 2$ бар, $X_k = 1.150 \cdot 10^{-2}$, $X_m = 8.518 \cdot 10^{-2}$; r — молярная доля компонентов, M — молекулярная масса.

Таблица 2

| Вариант | T, К | M | $r_i \cdot 10^2$ | | | | | | | | | |
|---|-------|-------|------------------|---|----------------|----------------|----------------|------|------------------|------|-----------------|------|
| | | | H | O | H ₂ | N ₂ | O ₂ | OH | H ₂ O | CO | CO ₂ | NO |
| 1. Керосин [1] | 2 167 | 27.59 | 0.05 | 0 | 2.11 | 68.49 | 0 | 0.04 | 12.98 | 7.12 | 8.39 | 0 |
| 2. Керосин ($T = \text{const}$, $p = \text{const}$) | 2 167 | 27.53 | 0.05 | 0 | 2.11 | 68.49 | 0 | 0.03 | 13.15 | 7.07 | 8.24 | 0 |
| 3. Модельное горючее ($T = \text{const}$, $p = \text{const}$) | 2 167 | 27.53 | 0.04 | 0 | 2.11 | 68.49 | 0 | 0.03 | 13.15 | 7.07 | 8.24 | 0 |
| 4. Керосин | 2 159 | 27.53 | 0.04 | 0 | 2.12 | 68.49 | 0 | 0.03 | 13.15 | 7.07 | 8.25 | 0 |
| 5. Модельное топливо 1 ($\beta = 0$) | 2 434 | 27.48 | 0.19 | 0 | 1.97 | 68.31 | 0.03 | 0.23 | 13.08 | 7.37 | 7.88 | 0.08 |
| 6. Модельное топливо 2 ($\beta = 0.23$) | 2 166 | 27.62 | 0.04 | 0 | 1.76 | 73.77 | 0 | 0.03 | 10.94 | 5.89 | 6.86 | 0.01 |

Примечание. $\alpha = 0.8$, $p = 2$ бар, $X_k = 1.434 \cdot 10^{-2}$, $X_m = 1.042 \cdot 10^{-1}$; r — молярная доля компонентов, M — молекулярная масса.

Таблица 3

| Вариант | T, К | M | $r_i \cdot 10^2$ | | | | | | | | | |
|---|-------|-------|------------------|------|----------------|----------------|----------------|------|------------------|------|-----------------|------|
| | | | H | O | H ₂ | N ₂ | O ₂ | OH | H ₂ O | CO | CO ₂ | NO |
| 1. Керосин [1] | 2 100 | 28.91 | 0 | 0.02 | 0.03 | 73.51 | 3.14 | 0.18 | 10.74 | 0.13 | 11.00 | 0.39 |
| 2. Керосин ($T = \text{const}$, $p = \text{const}$) | 2 100 | 28.87 | 0 | 0.01 | 0.02 | 73.54 | 3.12 | 0.17 | 10.86 | 0.12 | 10.85 | 0.38 |
| 3. Модельное горючее ($T = \text{const}$, $p = \text{const}$) | 2 100 | 28.87 | 0 | 0.01 | 0.02 | 73.54 | 3.12 | 0.17 | 10.86 | 0.12 | 10.85 | 0.38 |
| 4. Керосин | 2 096 | 28.87 | 0 | 0.01 | 0.02 | 73.54 | 3.12 | 0.17 | 10.86 | 0.12 | 10.85 | 0.38 |
| 5. Модельное топливо 1 ($\beta = 0$) | 2 278 | 28.80 | 0.01 | 0.05 | 0.07 | 73.26 | 3.12 | 0.36 | 10.68 | 0.41 | 10.53 | 0.57 |
| 6. Модельное топливо 2 ($\beta = 0.17$) | 2 084 | 28.76 | 0 | 0.01 | 0.02 | 77.20 | 2.67 | 0.15 | 9.36 | 0.10 | 9.35 | 0.35 |

Примечание. $\alpha = 1.2$, $p = 2$ бар, $X_k = 9.605 \cdot 10^{-3}$, $X_m = 7.200 \cdot 10^{-2}$; r — молярная доля компонентов, M — молекулярная масса.

на модельным горючим из более простых углеводородов при рассматриваемых параметрах состояния газа и об эквивалентности топлив с одинаковыми значениями коэффициента избытка окислителя.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ СОСТОЯНИЯ И СОСТАВА ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ КЕРОСИНА

При горении керосина и модельного горючего в режиме с постоянным давлением или плотностью температуры продуктов сгорания будут различаться вследствие отличия их теплот сгорания в стандартных условиях. Это, в свою очередь, приведет к отличию составов продуктов сгорания керосина и модельного горючего. Обеспечить точное совпадение составов и температур при использовании одинакового окислителя невозможно. Значение теплоты сгорания метана $\Delta H_{\text{СН}_4} = 5.0208 \cdot 10^4$ кДж/кг, ацетилен — $\Delta H_{\text{С}_2\text{Н}_2} = 4.8116 \cdot 10^4$ кДж/кг, поэтому температура продуктов сгорания модельной смеси будет превышать температуру сгорания керосина. В первую очередь необходимо вычислить эти температуры, чтобы выяснить степень их отличия.

Вариант 4 в табл. 1–3 соответствует горению керосина при заданном давлении в стандартном воздухе. Видно, что приведенная выше энтальпия образования условной молекулы керосина в стандартных условиях действительно обеспечивает справочные значения температуры и состава конечных продуктов в камере сгорания. Результаты расчетов горения модельного горючего при заданном давлении (модельное топливо 1, вариант 5 в таблицах) отличаются от аналогичных данных для керосина. Температура продуктов сгорания модельного топлива в воздухе, как отмечалось ранее, превышает температуру продуктов сгорания керосина. В режиме $p = \text{const}$ превышение составляет $150 \div 300$ К, что приводит к отличию составов. По-видимому, в некоторых случаях такое отличие может быть приемлемым. Однако имеется возможность выбрать такой состав топливной смеси, при котором температура продуктов сгорания будет близка к температуре продуктов сгорания керосина. Этого можно достичь изменением количества инертного компонента (аргона) и почти инертного азота, входящих в состав воздуха. Добавляя в стандартный воздух некоторые количества

этих компонентов, можно получить обедненный кислородом воздух: при сгорании в нем модельного горючего температура равновесного газа будет меньше. Более удобным для практических целей является азот.

Разбавление воздуха можно характеризовать коэффициентом $\beta = \Delta p/p$, где Δp — увеличение парциального давления азота в некотором объеме, содержащем стандартный воздух с давлением p . Значения температуры продуктов сгорания модельного горючего в обедненном кислородом воздухе (модельное топливо 2, вариант 6 в таблицах) и его состав сравнивались с соответствующими параметрами при горении керосиновоздушного топлива при одинаковых значениях коэффициента избытка окислителя. Вследствие различного содержания кислорода количества элементов на единицу массы этих топлив различаются, и поэтому составы продуктов сгорания никогда не могут быть в точности одинаковыми, а относительные доли модельного горючего и керосина в топливах будут удовлетворять соотношению (1) только приближенно. Изменением коэффициента разбавления воздуха β можно, однако, добиться совпадения температур в керосиновоздушном и модельном топливах и минимального различия их составов. Расчеты позволяют определить значения коэффициента β для каждого состава модельного топлива 2, характеризующего коэффициентом избытка окислителя α .

Расчеты показали, что для стехиометрической смеси модельного горючего в обедненном кислородом воздухе и для смесей с избытком окислителя температура продуктов сгорания при коэффициенте разбавления $\beta = 0.17$ соответствует температуре продуктов сгорания топлива на основе керосина. Модельные смеси с избытком горючего ($\alpha < 1$) одним значением коэффициента разбавления описать не удастся; при $\alpha = 0.8$ требуется разбавление $\beta = 0.23$, при $\alpha = 0.5$ — $\beta = 0.55$, а при $\alpha = 0.25$ — $\beta = 2$. Значения температур в вариантах 4 и 6 таблиц или совпадают, или отличаются незначительно; совпадение составов в диапазоне $0.5 < \alpha < 3$ удовлетворительное, в том числе и для азота N_2 , увеличение концентрации которого обусловлено обеднением воздуха кислородом.

В [5] приведены результаты расчетов параметров состояния и состава продуктов равновесного сгорания керосина, модельных сме-

сей, а также ацетилена в режиме с постоянной плотностью при заданных значениях давления продуктов сгорания $p = 0.5; 1.0$ и 1.5 МПа. Расчеты демонстрируют удовлетворительное совпадение температур и составов продуктов сгорания керосиновоздушного топлива и модельного топлива 2 в данном режиме с указанными выше коэффициентами β .

Разбавление воздуха можно осуществить и аргоном, но при более высоких степенях разбавления. Так, при $\alpha \geq 1$ требуется разбавление $\beta = 0.24$, для $\alpha = 0.5$ — $\beta = 0.85$, для $\alpha = 0.25$ — $\beta = 3$. Значения концентраций компонентов продуктов сгорания коррелируют с величинами в керосиновоздушном топливе, однако вследствие значительного содержания аргона в целом состав продуктов мало похож на «керосиновый».

Сформулируем основные выводы работы.

1. Показана возможность моделирования компонентного состава и параметров состояния газа, образующегося в результате равновесного сгорания авиационного керосина в воздухе, горючим, состоящим из равных количеств метана и ацетилена.

2. Равновесные составы продуктов сгорания керосина и модельного горючего в воздухе в точности идентичны при заданных значениях давления или плотности, температуры и коэффициента избытка окислителя.

3. При сгорании керосина и модельного горючего в режиме с заданными давлением или плотностью можно обеспечить удовлетворительное совпадение температур и составов конечных продуктов, если в качестве окислителя для модельного горючего использовать обедненный кислородом воздух.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Термодинамические** и теплофизические свойства продуктов сгорания / В. Е. Алемасов, А. Ф. Дрегалли, А. П. Тишин и др. М.: АН СССР, ВИНТИ, 1972. Т. 3.
2. **Физико-химические** и эксплуатационные свойства реактивных топлив: Справочник / Н. Ф. Дубовкин, В. Г. Маланичева, Ю. П. Массур, Е. П. Федоров. М.: Химия, 1985.
3. **Смехов Г. Д.** Эффективные алгоритмы расчета состояний многокомпонентного реагирующего газа в газовой динамике // Мат. моделирование. 1993. Т. 5, № 2. С. 104–118.
4. **Смехов Г. Д., Фотиев В. А.** О вычислении равновесного состава высокотемпературного газа // Журн. вычислит. математики и мат. физики. 1978. Т. 1, № 5. С. 1283–1290.
5. **Смехов Г. Д., Хмелевский А. Н.** Моделирование сгорания керосина смесью углеводородных горючих в газовой фазе: Отчет НИИ механики МГУ; № 4787. М., 2005.

Поступила в редакцию 16/V 2006 г.