

УДК 621.45.022.5

Код ГРНТИ 55.42.455

doi 10.54708/19926502_2024_28210489

ПОДХОД К ОПТИМИЗАЦИИ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ГЛОБАЛЬНЫХ МЕХАНИЗМОВ ГОРЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К РАБОЧИМ УСЛОВИЯМ ГТУ

В. Д. Липатов*, А. Е. Кишалов, Е. Д. Липатова

*lipatvvadim@gmail.com

ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий»

Поступила в редакцию 29.03.2024

Аннотация. В работе представлено обоснование использования глобальных механизмов горения и подход для их оптимизации на примере метана. Дается алгоритм оптимизации, а также определяются оптимальные базисные данные, представленные экспериментом или известным решением, которые могут использоваться в качестве эталонных значений. В общем виде предлагается механизм горения углеводородов, являющийся обобщением используемых стандартных механизмов, и приводятся результаты его оптимизации – подобранные значения параметров всех реакций, характеризующих их кинетику. Показаны результаты верификации оптимизированного механизма для кинетических и диффузионных типов пламени в одномерной постановке, в том числе и для рабочих условий (газотурбинных установок) ГТУ. Выполнен анализ возможных улучшений подхода к оптимизации механизма.

Ключевые слова: механизм горения; ГТУ; камера сгорания; кинетика горения; оптимизация.

ВВЕДЕНИЕ

Развитие как авиационной техники, так и наземной газотурбинной энергетики сопряжено с ростом термогазодинамических параметров цикла и изменением конструкции основных узлов [1]. Вместе с тем увеличение температуры рабочего тела на входе в турбину при сохранении или улучшении удельных параметров двигателя в целом приводит к росту теплонапряженности объема камеры сгорания (КС). Данное обстоятельство диктует условия для совершенствования существующих и разработки новых методов расчета параметров рабочего режима КС, развитие которых дополнительно стимулируется ростом требований по нормам выброса вредных веществ. В частности, к расчетным параметрам камер сгорания могут относиться интенсивность образования и выход оксидов азота и углерода, акустические характеристики и соответствующая этому устойчивость процесса горения, неравномерность параметров на входе в турбину. Значения этих параметров существенно зависят от кинетики процесса горения и от того, насколько интенсивно в камере протекают процессы турбулентного перемешивания [2].

В настоящее время наиболее точный метод оценки параметров рабочего процесса КС (за исключением экспериментальных исследований) – это трехмерное численное моделирование. Развитие методов оценки параметров турбулентного течения в рамках численного моделирования связано с усложнением моделей турбулентности, финальной формой которых является непосредственный расчет структур колмогоровского масштаба –

прямое численное моделирование [3]. Использование даже более простых подходов (например, модель крупных вихрей) требует существенных вычислительных ресурсов, которые зачастую ограничены. Дополнительно ситуация осложняется тем, что для адекватного моделирования процесса горения углеводородных топлив требуется использование кинетических механизмов, включающих в себя тысячи реакций и сотни компонентов, для каждого из которых требуется решать уравнения переноса. Использование таких механизмов для прикладных инженерных задач при проектировании реальных КС в совокупности со сложными моделями турбулентности и нестационарной природой процесса горения является маловероятным в обозримом будущем. Это требует разработки методов упрощения моделирования кинетики процесса горения при сохранении требуемой точности в заданном диапазоне изменения рабочих параметров. Такие методы разрабатываются с момента зарождения математической теории горения и взрыва и могут быть поделены на несколько категорий: использование глобальных механизмов горения [4], редуцированной химии [5], табулированной химии с использованием формализма функции плотности вероятности [6], виртуальных механизмов [7]. Несмотря на обилие методов упрощения моделирования кинетики процесса горения, каждый из них обладает своими ограничениями, что обуславливает актуальность задачи дальнейшего развития этих методов. В частности, развитием методов, сопряженных с глобальными механизмами, может являться оптимизация и модернизация кинетических параметров, составляющих механизм реакций. Целью настоящей работы являлась проработка такого подхода с формированием механизма горения углеводородов в общем виде и оптимизацией его параметров на примере метана.

ПОДБОР БАЗИСНЫХ ДАННЫХ

Отправной точкой для оптимизации упрощенных механизмов горения служат экспериментальные данные по ряду важнейших параметров, характеризующих процесс горения: ламинарная скорость распространения пламени u_L , критические значения степени растяжения a_{crit} , время задержки воспламенения, профили концентраций наиболее важных компонентов. Первые два параметра – скорость распространения пламени и критические значения степени растяжения – являются основными характеристиками предварительно перемешанных (кинетических) и диффузионных видов пламени соответственно. Для них имеется большое количество экспериментальных данных для диапазона значений давлений, температур и эквивалентных соотношений, не характерных для газотурбинных установок (ГТУ). Экспериментальные данные хотя бы для средних параметров ГТУ [8] исчисляются единицами [9–11], а для расчета данных в некоторых промежуточных точках единственным доступным вариантом остается использование валидных детальных механизмов горения. Кроме того, использование этих механизмов позволяет получать данные по профилям концентраций компонентов, экспериментальные данные по которым зачастую отсутствуют.

На начальном этапе работы было выполнено исследование адекватности работы ряда рассмотренных детальных механизмов горения природного газа (преимущественно метана) как для атмосферных условий, так и для условий, характерных для ГТУ. Параметры u_L и a_{crit} рассчитывались в одномерной постановке, что позволило значительно сократить время вычислений. Исследуемые механизмы с областью их применения приведены в табл. 1. Исходные данные для моделирования по u_L и a_{crit} – составы рабочих тел, граничные условия, диапазоны изменения варьируемых параметров – приводятся соответственно в работах [12] и [10]. В этих же работах приводятся экспериментальные данные, которые были использованы в качестве эталонных значений. Для расчета значения a_{crit} использовалась зависимость (1) [13]:

$$a_{crit} = \frac{4u_o}{L}, \quad (1)$$

где u_o – скорость окислителя; L – расстояние между входами по топливу и окислителю.

Таблица 1

Исследуемые детальные механизмы

Название	Количество реакций	Количество компонентов	Применимость
GRI-Mech 3.0	325	51	C ₁ , природный газ
FFCM	292	33	C ₁ , природный газ
USC II	784	111	H ₂ /CO/C ₁ -C ₄
CRECK C1-C3	1999	114	C ₁ -C ₃

Результаты расчетов в зависимости от эквивалентного соотношения ϕ , представляющего собой отношение масс топлива и окислителя к их стехиометрическому соотношению, показаны на рис. 1 и 2. Несмотря на то, что характерные давления работы ГТУ лежат ниже области в 40 атм, исследование работы механизмов в этой области может быть актуально из-за того, что имеются некоторые виды конвертированных ГТУ с высокой степенью сжатия [8]. Как показали результаты моделирования, среди рассмотренных механизмов наилучшие результаты по оценке u_L при давлении до 40 атм и температуре 298 К в диапазоне эквивалентного соотношения ϕ от 0,5 до 1,5 показали CRECK и USCII (рис. 1) со средними погрешностями 10,3 и 11 % соответственно. При повышении давления погрешность увеличивается по всему рассмотренному диапазону эквивалентного соотношения, и ее среднее значение составляет 39,6 и 33,8 % для CRECK и USCII.

Второй параметр, влияющий на процесс горения, – это температура воздуха на входе в КС. Механизмы сравнивались между собой и эталонными данными при двух различных температурах 600 и 800 К и характерном для ГТУ давлении 15 атм. В качестве эталонных данных использованы значения, рассчитанные по корреляции [14], которая получена при обработке большого количества экспериментов и обладает высокой степенью точности при рассматриваемых параметрах. С ростом температуры более предпочтительным становится механизм USCII, средняя погрешность которого – 17,6 % при температуре 800 К (рис. 2). При относительно малых температурах (600 К) наиболее оптимальным является механизм GRI со средней погрешностью 4,4 %, в то время как механизм USCII показывает отклонение в 9,2 %.

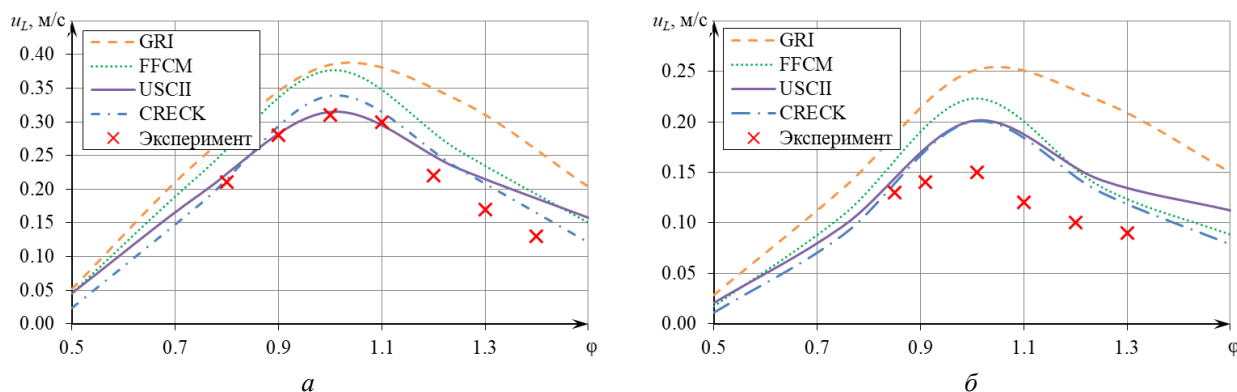


Рис. 1. Результаты расчета u_L при температуре 298 К и различных давлениях:
а – 40 атм; б – 60 атм

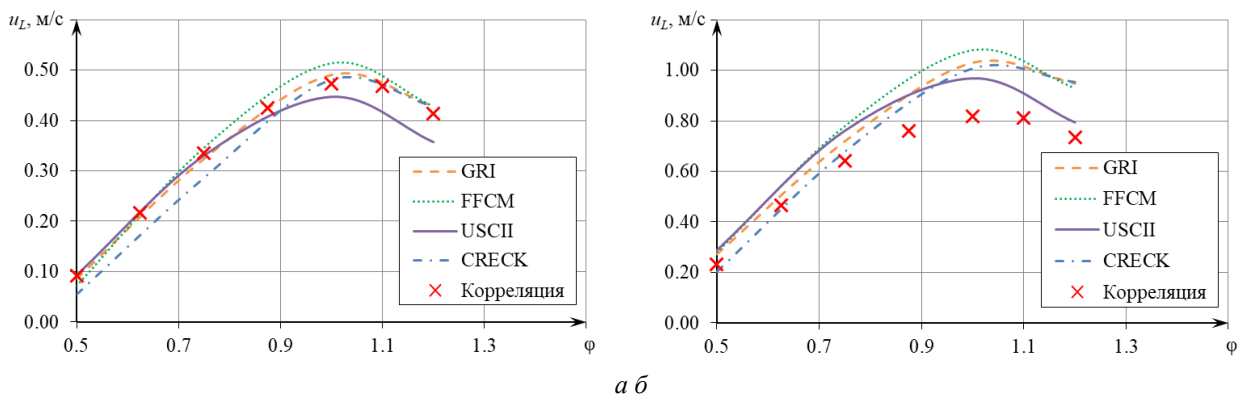


Рис. 2. Результаты расчета u_L при давлении 15 атм и различных температурах:
a – 600 К; *б* – 800 К

Применимость механизмов для моделирования диффузионных видов пламени была оценена при сопоставлении расчетных значений и результатов экспериментов [10] по a_{crit} при варьировании давления и массовой доли метана $\omega(\text{CH}_4)$ в составе топлива (комбинация с азотом). По результатам моделирования было установлено, что хорошую сходимость с экспериментом в диапазоне давлений до 2 МПа показывают механизмы USCII и FFCM с погрешностями 4,2 и 5,4 % соответственно (рис. 3). При работе на атмосферных условиях и варьировании состава топлива все рассмотренные механизмы показали примерно одинаковый результат с максимальной погрешностью по a_{crit} не более 20 % и средним значением погрешности 13,1 %.

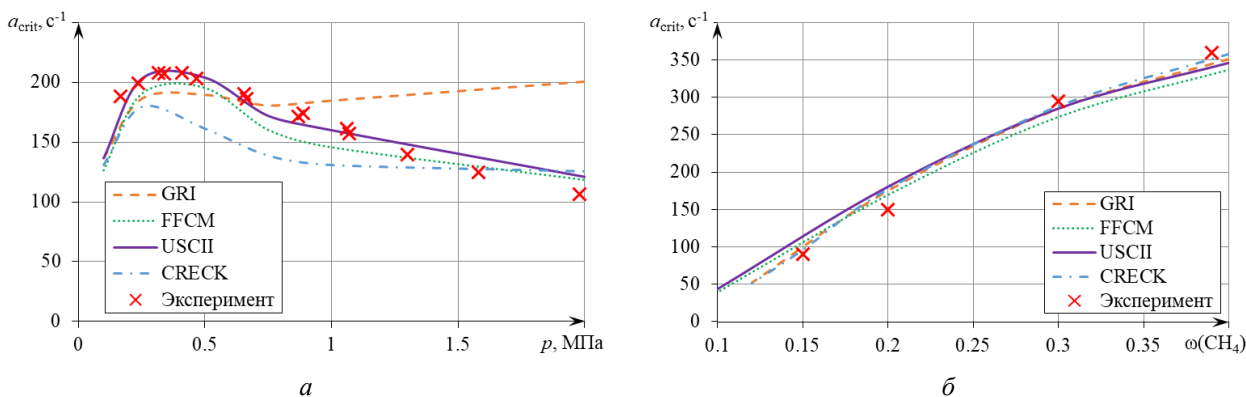


Рис. 3. Результаты расчета a_{crit} :
a – $\omega(\text{CH}_4) = 0,16$; $T = 298 \text{ K}$; *б* – $T = 298 \text{ K}$; $p = 1 \text{ атм}$

Из обобщения результатов моделирования по u_L и a_{crit} было установлено, что для численного исследования процессов горения природных газов преимущественно метанового состава при средних характерных параметрах на входе в КС ГТУ наиболее оптимальным является механизм USCII. Данный механизм был использован в качестве базисного для дальнейших работ – оптимизации глобальных механизмов горения в диапазоне давлений 1–20 бар, температур 350–550 °С и эквивалентного соотношения от 0,5 до 2,0.

ОПТИМИЗАЦИЯ ГЛОБАЛЬНОГО МЕХАНИЗМА ГОРЕНИЯ

К глобальным механизмам горения условно можно отнести те, количество реакций в которых меньше 10. Несмотря на узкую применимость в их первоначальном виде, они продолжают оставаться одним из методов расчетов кинетики в реагирующих потоках применительно к инженерным задачам. К классическим глобальным механизмам горения метана можно отнести двухступенчатый Westbrook-Dryer (WD2) [15] и четырехступенчатый Jones-Lindsted (JL) [16],

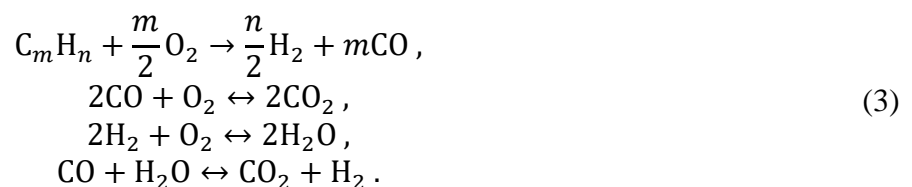
дополнительно учитывающий водород. Эти механизмы адекватно работают возле стехиометрической зоны при субатмосферных давлениях с отклонением u_L при выходе из этой зоны [11]. Другая ключевая особенность глобальных механизмов, моделирующих два или три основных продукта, – это отклонение адиабатной температуры горения от ее действительных значений для достаточно богатых смесей ($\varphi > 1,5$). Данный недостаток компенсируется введением дополнительного продукта сгорания (как правило, в качестве которого выступает H_2) и реакции, моделирующей его образование. Введение H_2 в глобальный механизм горения также позволяет более адекватно моделировать положение фронта пламени, поскольку учитывается перенос легкого компонента, для которого может быть важным эффект Соре.

Расширение области применимости глобальных механизмов горения может быть осуществлено за счет модернизации их кинетических параметров. Малое количество реакций позволяет оценить влияние каждого отдельного кинетического параметра в аррениусовской зависимости скорости реакции по всем реакциям на интересующие параметры и выделить среди них ключевые. Варьирование этих ключевых параметров приводит к задаче глобальной оптимизации, где целевой функцией является суммарная невязка по выбранным параметрам кинетических и диффузионных видов пламени (либо по одному из них). Аррениусовская зависимость образования компонента C имеет вид (2):

$$\frac{d[C]}{dt} = AT^b \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \prod [B_i]^{\alpha_i}, \quad (2)$$

где $[C]$ – концентрация образующегося компонента; A – предэкспоненциальный множитель; t – время; T – температура; b – температурная экспонента; E – энергия активации; R – универсальная газовая постоянная; $[B_i]$ – концентрация i -го реагирующего компонента; α_i – порядок реакции по i -му реагирующему компоненту.

В рамках настоящего исследования был рассмотрен стандартный глобальный механизм (3) окисления углеводорода и промежуточных продуктов (CO и H_2) с добавлением реакции взаимодействия продуктов, что позволяет более точно предсказывать равновесный состав. Механизм представлен в общем виде, что позволяет использовать его как универсальный, в том числе и в перспективе моделирования топлива, отличающегося от метана (с подбором соответствующих кинетических параметров).



Оптимизация механизма осуществлялась путем минимизации целевой функции, представленной выражением (4):

$$\delta = \sum \omega_p \left| \frac{x_{premix\ calc} - x_{premix\ exp}}{x_{premix\ exp}} \right| + \sum \omega_d \left| \frac{x_{diff\ calc} - x_{diff\ exp}}{x_{diff\ exp}} \right|, \quad (4)$$

где ω_p , ω_d – весовые коэффициенты для параметров кинетических и диффузионных видов пламени; $x_{premix\ calc}$, $x_{diff\ calc}$ – рассчитанные по глобальному механизму параметры кинетических и диффузионных видов пламени; $x_{premix\ exp}$, $x_{diff\ exp}$ – рассчитанные по базисному детальному механизму параметры кинетических и диффузионных видов пламени.

В качестве оптимизируемых по кинетическим видам пламени выступали следующие параметры: конечная и максимальная доли продуктов сгорания в ходе процесса горения, адиабатная температура сгорания, скорость распространения пламени. Для диффузионных видов пламени к таким параметрам относились: критическое значение степени растяжения пламени, максимальная температура при условии $a = a_{crit}$, концентрации компонентов в точке $T = T_{max}$.

Алгоритм оптимизации включал в себя следующие стадии:

1. Выбор диапазона изменения влияющих параметров (давление, температура, эквивалентное соотношение) и базисной точки для оптимизации всех кинетических параметров механизма.

2. Формирование базы данных по ключевым параметрам (профили концентраций конечных и промежуточных продуктов, температуры, характеристики диффузионных и перемешанных видов пламени) во всем рассматриваемом диапазоне согласно экспериментальным исследованиям и детальным механизмам.

3. Подбор значений всех кинетических параметров глобального механизма в базисной точке. Как показала практика, в качестве начального приближения на атмосферных условиях по параметру A хорошо подходит значение 10^{13} (с единицами измерения с, м, кмоль). Верхнее ограничение по энергии активации лимитируется значением 40000–45000 ккал/моль, характерным для реакций окисления углеводородов [17]. Условие минимизации функции представляется выражением (4).

4. Подбор оптимальных значений предэкспоненциальных факторов A_i каждой из реакций для остальных точек при фиксации остальных кинетических параметров согласно базовой точке.

В качестве математического метода оптимизации выступал подход дифференциальной эволюции, хорошо зарекомендовавший себя для задач подобного рода [18]. Для корректировки поведения механизмов при различных значениях эквивалентного соотношения были введены соответствующие функции по предэкспоненциальным факторам каждой из реакций. Вид полученных корректирующих функций показан на рис. 4. Зачастую такие функции представляются в виде аппроксимирующих гиперболических зависимостей [19]. В ходе настоящего исследования было установлено, что условие монотонности функций на заданном промежутке эквивалентных соотношений требует введения дополнительных ограничений, а также обуславливает некоторое снижение точности итоговых результатов. Для выполнения дальнейших расчетов полученные зависимости были оставлены в исходном виде, а их ввод в программный код осуществлялся без использования аппроксимации – использовались методы интерполяции.

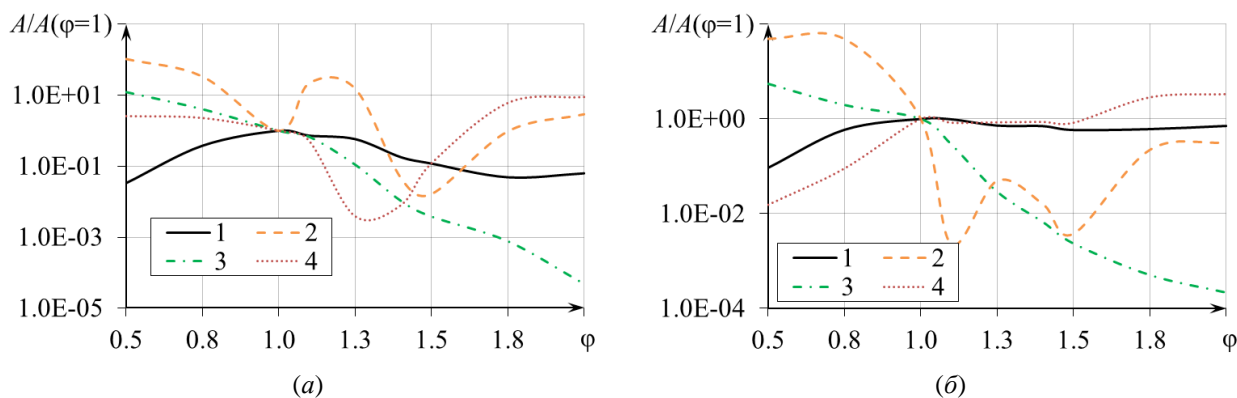


Рис. 4. Вид корректирующих зависимостей:
(а) атмосферные условия (1 атм, 288 К); (б) условия ГТУ (15 атм, 650 К)

Результаты выполненной оптимизации представляют собой механизм горения с подобранными кинетическими параметрами в базисной точке, представленными в табл. 2 для параметров $p_0 = 1$ атм, $T_0 = 298$ К и $p_0 = 15$ атм, $T_0 = 650$ К (средние условия ГТУ). Корректировка параметров A осуществляется согласно значениям, отображенным на рис. 4. Оптимизация механизма на атмосферных параметрах обусловлена тем, что на данных параметрах имеется об-

ширное количество экспериментальных данных по различным параметрам, позволяющих верифицировать полученные результаты и выполнить отладку методики оптимизации механизма.

Таблица 2

Оптимизированный механизм

№ реакции	A, с, м, кмоль		E, Дж/кмоль	Порядок реакции по компонентам	b
	Атмосферные условия	Условия ГТУ			
1	$7,75 \cdot 10^{13}$	$7,04 \cdot 10^{11}$	$1,29 \cdot 10^8$	CH ₄ = 0,551; O ₂ = 1,97	0
2	$4,52 \cdot 10^{12}$	$1,28 \cdot 10^{11}$	$1,28 \cdot 10^8$		
3	$3,30 \cdot 10^{13}$	$1,81 \cdot 10^{12}$	$5,62 \cdot 10^7$		
4	$7,30 \cdot 10^{13}$	$1,20 \cdot 10^{12}$	$1,97 \cdot 10^8$		

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Верификация полученных результатов осуществлялась путем сопоставления расчетных значений u_L , a_{crit} , профилей массовых долей компонентов с результатами моделирования согласно детальному механизму USCII, который показывает приемлемую точность как на атмосферных условиях, так и на условиях ГТУ [11, 20]. Основные результаты по кинетическому виду пламени для смесей как богатого, так и бедного типов показаны на рис. 5 и 6 для атмосферных условий и условий ГТУ соответственно. Кроме того, было выполнено сопоставление оптимизированного механизма M1 с классическими механизмами WD и JL. Стоит отметить, что механизм JL для рабочих условий ГТУ не показал адекватного результата – отсутствовало стабильное численное решение уравнений модели.

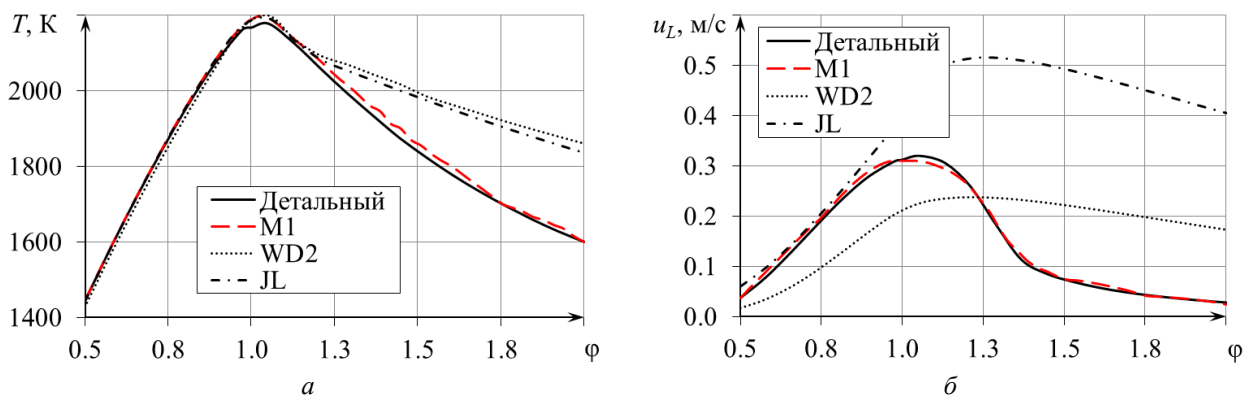


Рис. 5. Результаты моделирования кинетических видов пламени при атмосферных условиях:
a – T; б – u_L

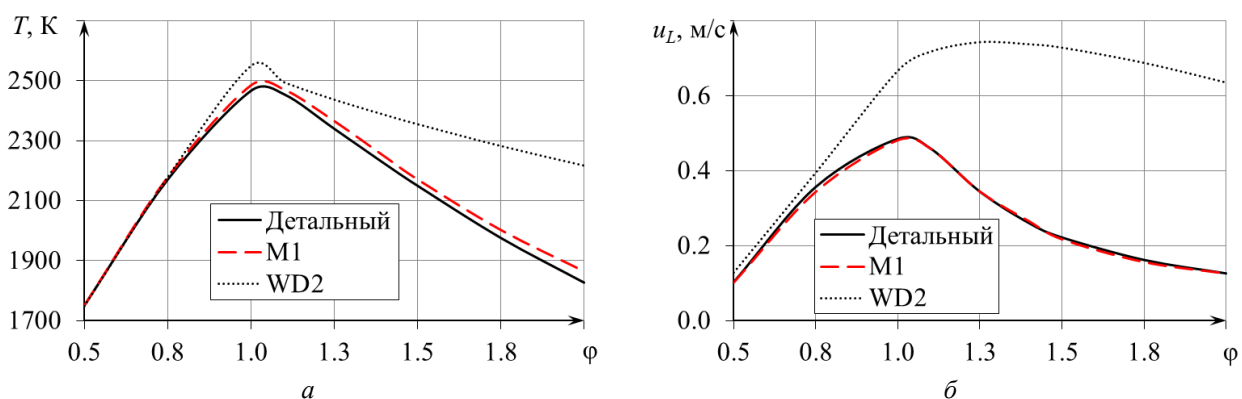


Рис. 6. Результаты моделирования кинетических видов пламени при условиях ГТУ:
a – T; б – u_L

В области обедненных смесей глобальные механизмы достаточно хорошо предсказывают температуру продуктов сгорания ввиду почти нулевого выхода промежуточных продуктов, а суммарный тепловой эффект реакции в большей степени определяется стехиометрическим соотношением продуктов. Переход в область богатых смесей приводит к тому, что классические механизмы показывают завышенное значение по температуре продуктов, тем более интенсивное, чем более богатой является смесь. Корректировка кинетических параметров позволила нивелировать этот эффект, сведя разницу в температурах до значений не более 2 % при всех рассмотренных условиях. Несколько иная картина наблюдается по скорости распространения пламени, где имеются отклонения между детальным и глобальными механизмами уже в области обедненных смесей. Ни один из классических механизмов не показывает адекватных результатов возле границ срыва, при этом область их адекватной работы является достаточно узкой и существенно зависит от рабочих условий. Корректировка механизма позволила свести погрешность в расчете u_L до значений не более 1 % по всей области эквивалентных соотношений.

Режим работы камеры сгорания определяется не только равновесными параметрами процесса горения, но и его динамикой. В этой связи, как уже было отмечено, в параметры оптимизации были заложены не только конечные доли продуктов сгорания, но и их максимальные значения в ходе процесса горения. Моделирование показало, что данный подход может быть актуален для стехиометрических и богатых смесей (рис. 7, структурная индикация линий согласно легенде рис. 5), по которым имеются расхождения в переходном процессе (характеризуемым приведенной длиной $l_{\text{прив}}$ одномерной трубы, которая может быть однозначно пересчитана во время) согласно глобальным и детальным механизмам. В качестве развития текущего подхода может быть рассмотрено более жесткое требование по минимизации отклонения кривых переходного процесса, а не только их конечной и экстремальной точек, что может дать более точные предсказания характеристик во фронте пламени при задачах большей пространственной размерности. В табл. 3 через черту даются средние относительные погрешности в определении параметров переходного процесса для атмосферных условий и условий ГТУ соответственно согласно глобальным и оптимизированному механизмам относительно эталонной кривой.

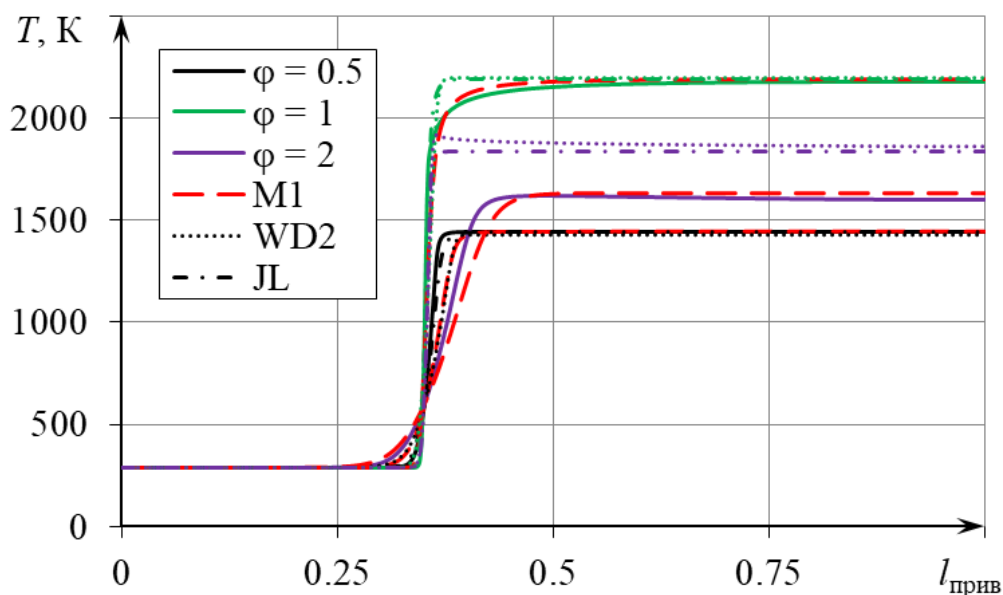


Рис. 7. Результаты моделирования кинетических видов пламени при условиях ГТУ

Таблица 3

Относительные погрешности расчета параметров переходного процесса

φ	Механизм	$\delta T, \%$	$\delta \text{CO}_2, \%$	$\delta \text{H}_2\text{O}, \%$	$\delta \text{H}_2, \%$	$\delta \text{CO}, \%$
0,5	M1	31,8 / 5,65	555 / 28,6	226 / 16,9	2239 / 1635	2987 / 1380
	WD	33,8 / 10,1	1264 / 51,0	469 / 19,4	–	675460 / 6050
	JL	13,2 / –	139 / –	88,9 / –	1370 / –	1222 / –
1	M1	26,1 / 6,15	794 / 22,1	362 / 16,3	67,9 / 36,5	644 / 43,7
	WD2	60,8 / 5,90	5563 / 55,9	943 / 6,13	–	944 / 88,8
	JL	40,4 / –	878 / –	634 / –	85,1 / –	1028 / –
2	M1	14,9 / 9,41	449 / 14,8	45,1 / 30,2	119 / 69,8	171 / 95,6
	WD2	156,8 / 24,5	2103 / 153	210 / 34,0	–	100 / 93,3
	JL	150,3 / –	1069 / –	242 / –	99,8 / –	297 / –

Оптимизация механизма для второго типа пламени, диффузионного, позволила наложить дополнительные ограничения на кинетические параметры в базисной точке, что позволило уменьшить количество степеней свободы оптимизационной задачи и получить более обоснованные значения аргументов. Как видно из рис. 8, механизмы JL и M1 обеспечивают примерно одинаковую точность в предсказании профиля температуры с погрешностью от 4,8 до 7 % (табл. 4) на атмосферных условиях и условиях ГТУ. Механизм WD ожидаемо показывает менее точные результаты, в том числе и за счет неверного предсказания соотношения между продуктами сгорания (рис. 9).

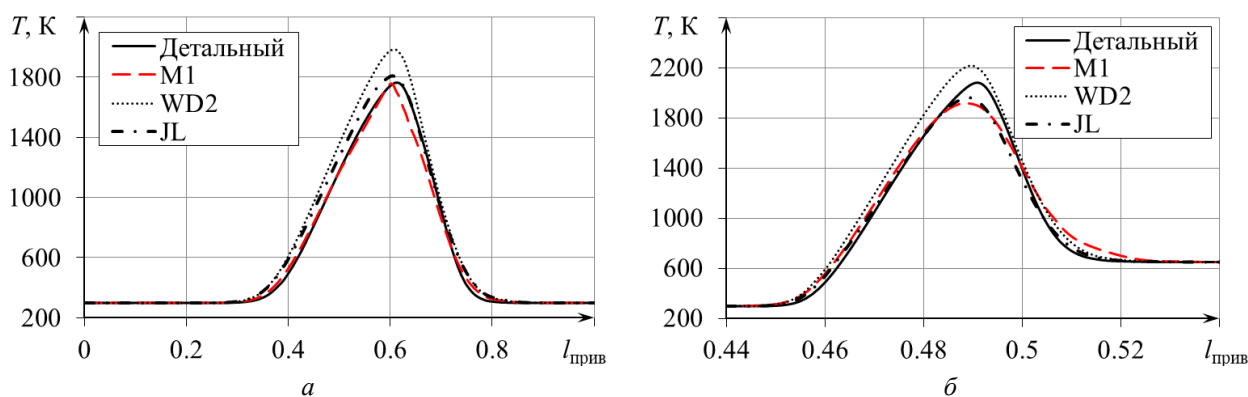


Рис. 8. Результаты моделирования диффузионного типа пламени:

a – атмосферные условия; *б* – условия ГТУ

В сравнении с механизмом JL, который по своей структуре похож на предлагаемый механизм M1, последний, за счет оптимизации его кинетических параметров, позволяет более точно предсказывать профили распределения как промежуточных, так и конечных продуктов сгорания (рис. 9 и 10), приведенных в нормированном виде относительно значений моделирования при помощи детального механизма. Особенно сильно данное различие проявляется на условиях ГТУ, где разница в точности предсказания может отличаться до трех раз (табл. 4). Для механизма WD2 отсутствуют данные по H_2 ввиду того, что данный механизм не включает в себя этот компонент. В табл. 4 через черту приводятся средние относительные погрешности в определении параметров диффузионного пламени для атмосферных условий и условий ГТУ соответственно согласно глобальным и оптимизированному механизмам относительно эталонной кривой.

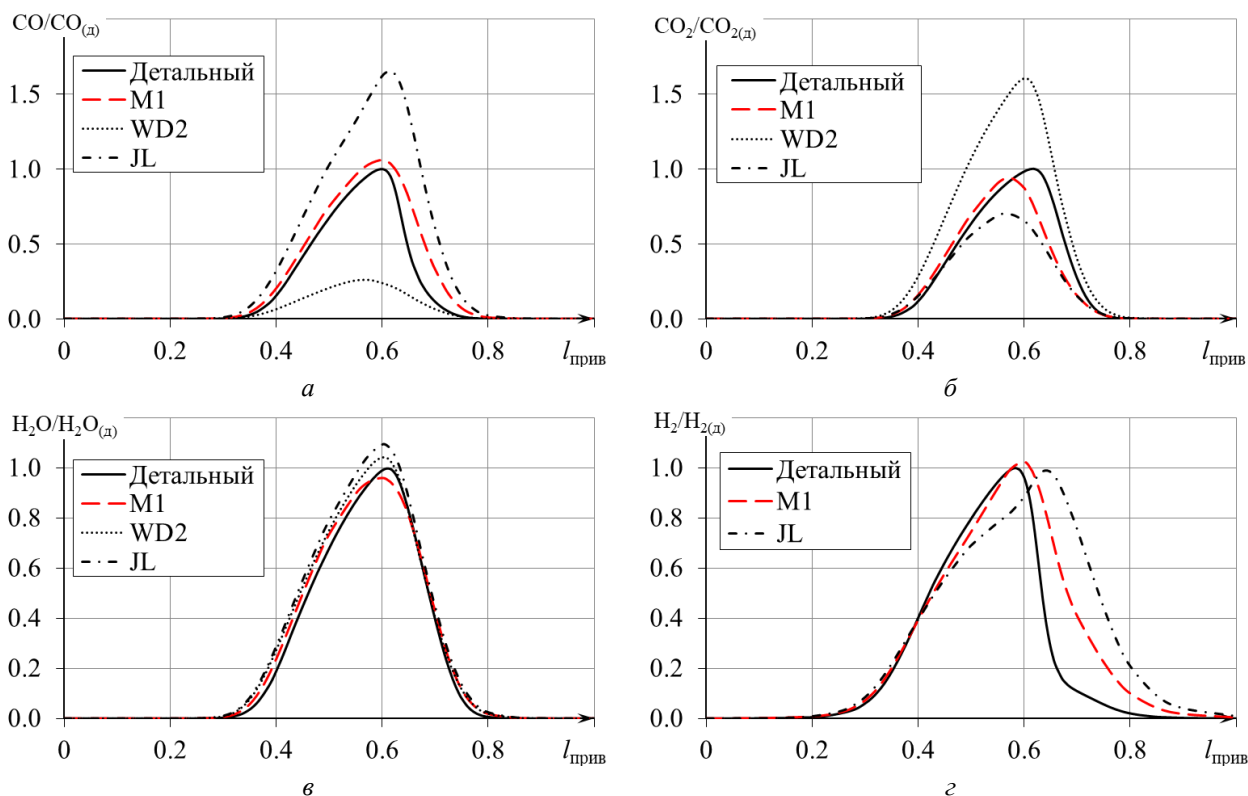


Рис. 9. Результаты моделирования диффузионного типа пламени при атмосферных условиях:
 а – профиль CO ; б – профиль CO_2 ; в – профиль H_2O ; г – профиль H_2

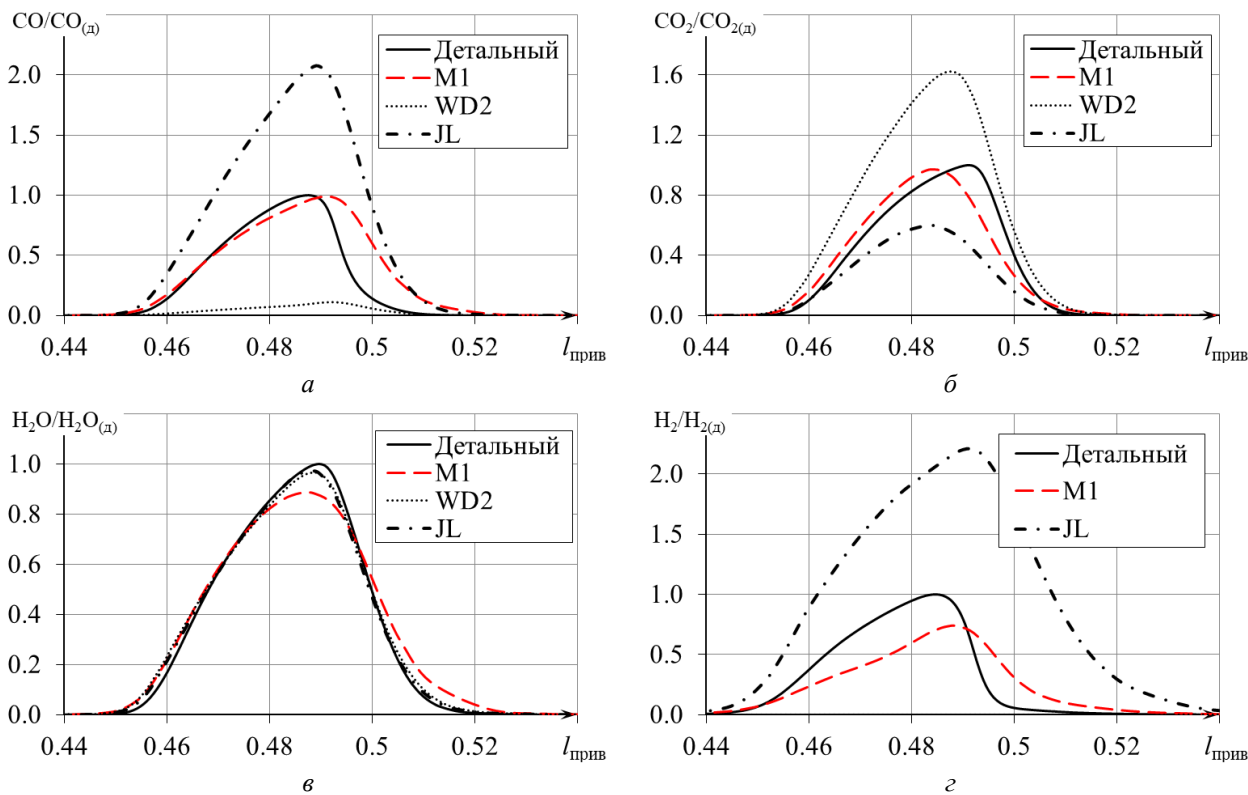


Рис. 10. Результаты моделирования диффузионного типа пламени при условиях ГТУ:
 а – профиль CO ; б – профиль CO_2 ; в – профиль H_2O ; г – профиль H_2

Таблица 4

Относительные погрешности расчета параметров профилей для диффузионного типа пламени

Механизм	δT , %	δCO_2 , %	δH_2O , %	δH_2 , %	δCO , %	δa_{crit} , %
M1	5,23 / 5,27	42,8 / 34,0	59,8 / 29,7	157 / 138	225 / 117	15,8 / 16,1
WD	9,01 / 13,0	109 / 112	29,1 / 35,8	-	75,5 / 58,9	54,2 / 106
JL	4,87 / 7,00	67,7 / 46,7	19,7 / 50,9	1154 / 292	310 / 305	148 / 287

Критическая скорость растяжения пламени механизмом M1 предсказывается значительно точнее, чем механизмами JL и WB с погрешностью в 15,8 и 16,1 % на атмосферных условиях и условиях ГТУ соответственно. Увеличение рабочих параметров приводит к более существенному отклонению результатов моделирования по стандартным механизмам от эталонного значения. При рабочих условиях ГТУ оптимизация механизма горения способна дать выигрыш в точности, на порядок отличающейся от стандартных механизмов (табл. 4). В дополнение к повышенной точности расчета предлагаемый механизм показывает стабильное решение для обоих рассмотренных видов пламени, что будет являться особенно актуальным при проведении полноценных инженерных трехмерных расчетов реальных устройств, где проблема жесткости системы уравнений химической кинетики может значительно увеличить временные затраты. Однако данный подход требует дальнейшего расширения и подразумевает верификацию как на плоских, так и на пространственных задачах.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках выполненной работы показана необходимость совершенствования методов оптимизации параметров реакций в химически реагирующих газодинамических потоках применительно к пространственным задачам КС ГТУ и газотурбинных двигателей (ГТД). Сформирован подход, согласно которому для упрощения таких расчетов могут использоваться глобальные механизмы горения с оптимизацией кинетических параметров реакций на основе базисных данных по двум видам пламени: кинетическому и диффузионному. В качестве базисных данных могут использоваться как экспериментальные данные, так и результаты расчетов согласно детальным механизмам. Выполнено сравнение различных детальным механизмов, по которому были выделены механизмы, пригодные для выполнения процесса оптимизации как на атмосферных, так и на средних условиях на входе в КС ГТУ, – 650 К, 15 атм.

В общем виде предложен механизм M1 для моделирования горения углеводородов, параметры которого были оптимизированы для двух рабочих условий. Даны оптимизированные значения кинетических параметров этого механизма по всем его реакциям, а также приведены значения корректирующих функций для предэкспоненциального фактора, позволивших повысить гибкость механизма в области обедненных и богатых смесей. Механизм M1 показывает хорошую сходимость с результатами расчетов согласно отобранному детальному механизму как по характерным параметрам двух видов пламени (скорость распространения и критическая скорость растяжения), так и по значениям температуры и концентраций компонентов в различных точках процесса. Для кинетического пламени средняя погрешность по определению значения температуры составила не более 2 % для всех условий, а по значению скорости распространения пламени – не более 1 %. По диффузионному пламени погрешность в определении ключевого параметра – критической скорости растяжения – составила не более 15,8 и 16,1 % для атмосферных условий и условий ГТУ. Для сравнения, наиболее распространенные глобальные механизмы горения WD2 и JL для последнего параметра обеспечивают погрешность от 54 до 287 % в зависимости от условий работы.

Отмеченные моменты позволяют говорить о применимости предлагаемого подхода, который даст возможность сократить время моделирования рабочего процесса камер сгорания

ГТУ и ГТД в трехмерной постановке при сохранении требуемой точности и стабильности расчета с соответствующим сокращением времени проектирования устройства.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Иноземцев А. А.** Использование перспективных технологий авиационных газотурбинных двигателей для создания энергетических ГТУ большой мощности // *Электрические станции*. 2020. № 1. С. 29-35. [A.A. Inozemtsev, The use of promising technologies of aviation gas turbine engines to create high-power gas turbine units (in Russian) // *Electrical Stations*. 2020. № 1. P. 29-35.]
2. **Lieuwen T., Neumeier Y., Zinn B. T.** The role of unmixedness and chemical kinetics in driving combustion instabilities in lean premixed combustors // *Combustion Science and Technology*. 1998. Vol. 135. № 1-6. P. 193-211.
3. **Moin P., Mahesh K.** Direct numerical simulation: a tool in turbulence research // *Annual Review of Fluid Mechanics*. 1998. Vol. 30. № 1. P. 539-578.
4. **Andersen J. et al.** Global combustion mechanisms for use in CFD modeling under oxy-fuel conditions // *Energy & Fuels*. 2009. Vol. 23. № 3. P. 1379-1389.
5. **Bulat G., Jones W. P., Marquis A. J.** NO and CO formation in an industrial gas-turbine combustion chamber using LES with the Eulerian sub-grid PDF method // *Combustion and Flame*. 2014. Vol. 161. № 7. P. 1804-1825.
6. **Van Oijen J. A. et al.** State-of-the-art in premixed combustion modeling using flamelet generated manifolds // *Progress in Energy and Combustion Science*. 2016. Vol. 57. P. 30-74.
7. **Cailler M. et al.** Building-up virtual optimized mechanism for flame modeling // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2017. Vol. 36. № 1. P. 1251-1258.
8. **Кишалов А. Е., Липатов В. Д.** Исследование тенденций развития основных параметров газотурбинных установок // *Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета*. 2021. Т. 25. № 3 (93). С. 89-97. [A.D. Kishalov, V.D. Lipatov, Study into the development tendencies of the main parameters of gas turbine units (in Russian) // *Vestnik UGATU*. 2021. Vol. 25. № 3 (93). P. 89-97.]
9. **Amirante R. et al.** Laminar flame speed correlations for methane, ethane, propane and their mixtures, and natural gas and gasoline for spark-ignition engine simulations // *International Journal of Engine Research*. 2017. Vol. 18. № 9. P. 951-970.
10. **Niemann U., Seshadri K., Williams F. A.** Methane, ethane, and ethylene laminar counterflow diffusion flames at elevated pressures: Experimental and computational investigations up to 2.0 MPa // *Combustion and Flame*. 2014. Vol. 161. № 1. P. 138-146.
11. **Zettervall N., Fureby C., Nilsson E. J. K.** Evaluation of chemical kinetic mechanisms for methane combustion: A review from a CFD Perspective // *Fuels*. 2021. Vol. 2. № 2. P. 210-240.
12. **Rozenchan G. et al.** Outward propagation, burning velocities, and chemical effects of methane flames up to 60 atm // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2002. Vol. 29. № 2. P. 1461-1470.
13. **Eckart S. et al.** Experimental and numerical investigations on extinction strain rates in non-premixed counterflow methane and propane flames in an oxygen reduced environment // *Fuel*. 2021. Vol. 298. P. 120781.
14. **Amirante R. et al.** Laminar flame speed correlations for methane, ethane, propane and their mixtures, and natural gas and gasoline for spark-ignition engine simulations // *International Journal of Engine Research*. 2017. Vol. 18. № 9. P. 951-970.
15. **Westbrook C. K., Dryer F. L.** Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames // *Combustion Science and Technology*. 1981. Vol. 27. № 1-2. P. 31-43.
16. **Jones W. P., Lindstedt R. P.** Global reaction schemes for hydrocarbon combustion // *Combustion and Flame*. 1988. Vol. 73. № 3. P. 233-249.
17. **Зельдович Я. Б. и др.** Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980. 478 с. [Ya.B. Zeldovich et al. *Mathematical Theory of Combustion and Explosion* (in Russian). Moscow: Nauka, 1980. 478 p.]
18. **Franzelli B. et al.** Large eddy simulation of combustion instabilities in a lean partially premixed swirled flame // *Combustion and Flame*. 2012. Vol. 159. № 2. P. 621-637.
19. **Franzelli B. et al.** A two-step chemical scheme for kerosene-air premixed flames // *Combustion and Flame*. 2010. Vol. 157. № 7. P. 1364-1373.
20. **Coogan S. et al.** Evaluation of kinetic mechanisms for direct fired supercritical oxy-combustion of natural gas // *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air*. – American Society of Mechanical Engineers, 2016. Vol. 49750. P. V04AT04A037.

ОБ АВТОРАХ

ЛИПАТОВ Вадим Дмитриевич, старший преподаватель каф. АТиТ, УУНИТ.

КИШАЛОВ Александр Евгеньевич, к. т. н., преподаватель каф. АД, УУНИТ.

ЛИПАТОВА Елизавета Дмитриевна, студент каф. ВВТиС, УУНИТ.

METADATA

Title: An approach to optimizing the kinetic parameters of global combustion mechanisms in relation to the operating conditions of gas turbine units.

Authors: V. D. Lipatov, A. E. Kishalov, E. D. Lipatova

Affiliation: Ufa University of Science and Technology, Russia.

Email: lipatvvdim@gmail.com

Language: Russian.

Source: Vestnik UGATU (scientific journal of Ufa University of Science and Technology), vol. 28, no. 2 (104), pp. 89-101, 2024. ISSN 2225-2789 (Online), ISSN 1992-6502 (Print).

Abstract: The paper presents a rationale for the use of global combustion mechanisms and an approach for their optimization using methane as an example. An optimization algorithm is given and the optimal basis data represented by an experiment or a known solution is determined which can be used as reference values. In general form a mechanism for the combustion of hydrocarbons is proposed and the results of its optimization are presented which is fitted values of the parameters of all reactions that characterize their kinetics. The results of verification of the optimized mechanism for kinetic and diffusion types of flame in a one-dimensional problem are shown. An analysis of possible improvements to the mechanism optimization approach was performed.

Keywords: combustion mechanism, GTU, combustion chamber, combustion kinetics, optimization.

About authors:

LIPATOV, Vadim Dmitrievich, Assistant Professor, Ufa University of Science and Technology.

KISHALOV, Alexnder Evgenyevich, Candidate of Technical Sciences, Professor, Ufa University of Science and Technology.

LIPATOVA, Elizaveta Dmitrievna, student, Ufa University of Science and Technology.