

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ АКАДЕМИКА С.П. КОРОЛЕВА»
(САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

На правах рукописи

Эрнандэс Моралес Марио

РАЗРАБОТКА МЕТОДА МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ НАГРЕВА И
ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ЖИДКОГО ТОПЛИВА В
КАМЕРАХ СГОРАНИЯ АВИАЦИОННЫХ ГАЗОТУРБИННЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ

2.5.15 – Тепловые, электроракетные двигатели
и энергоустановки летательных аппаратов

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата технических наук

Научный руководитель:
Матвеев Сергей Геннадьевич
кандидат технических наук, доцент

Самара – 2023

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
1 АНАЛИЗ СОВРЕМЕННОГО СОСТОЯНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ ПРОЦЕССОВ СМЕСЕОБРАЗОВАНИЯ В КАМЕРАХ СГОРАНИЯ АВИАЦИОННЫХ ГАЗОТУРБИННЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ	12
1.1 Влияние качества распыла и испарения жидкого топлива на характеристики камеры сгорания	13
1.2 Влияние различных параметров на характеристики испарения капель	29
1.3 Математические модели нагрева и испарения капель жидкого топлива	40
1.4 Моделирование авиационных топлив суррогатами керосина	54
2 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ И УСТАНОВКИ	68
2.1 Экспериментальные установки для исследования физико-химических свойств многокомпонентных топлив и их суррогатов	68
2.2 Экспериментальная установка для исследования характеристик нагрева и испарения многокомпонентных капель	73
3 ФОРМИРОВАНИЕ СУРРОГАТА АВИАЦИОННОГО КЕРОСИНА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАБОЧЕГО ПРОЦЕССА КАМЕР СГОРАНИЯ ГТД С УЧЕТОМ НАГРЕВА И ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ	78
3.1 Выбор и обоснование методов расчёта физико-химических свойств многокомпонентных углеводородных топлив и их суррогатов	78
3.2 Совершенствование методики формирования суррогатов керосина.....	106
3.3 Формирование суррогата авиационного керосина для моделирования рабочего процесса в КС ГТД с учётом процессов нагрева и испарения капель многокомпонентных углеводородных топлив	108
4 РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ НАГРЕВА И ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ ТОПЛИВА МНОГОКОМПОНЕНТНОГО СОСТАВА	114
4.1 Разработка модели нагрева и испарения капель	114
4.2 Расчёт кривой дистилляции.....	117

4.3	Валидация модели нагрева и испарения многокомпонентных капель	119
4.4	Сравнение характеристик испарения керосина по разным моделям нагрева и испарения	121
4.5	Выбор суррогата для моделирования процессов горения в КС	122
5	ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОЧЕГО ПРОЦЕССА В КАМЕРЕ СГОРАНИЯ АВИАЦИОННОГО ГТД С ПОМОЩЬЮ УСОВЕРШЕНСТВОВАННОГО МЕТОДА РАСЧЁТА ПРОЦЕССОВ НАГРЕВА И ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ	127
5.1	Математическая модель для моделирования процессов горения испарённого жидкого топлива в КС	127
5.2	Определение эмиссионных характеристик в камере сгорания авиационного малоразмерного ГТД	133
	ЗАКЛЮЧЕНИЕ	143
	СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	145

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования. Камера сгорания (КС) авиационного газотурбинного двигателя (ГТД) является важнейшим узлом, определяющим его экологические характеристики и в значительной степени влияющим на показатели эффективности, экономичности и надёжности двигателя. Рабочий процесс в КС ГТД характеризуется крайне сложными физическими явлениями, такими как турбулентные течения, распыл жидкого топлива с последующим дроблением на капли, нагрев и испарение многокомпонентных капель, смешение испаренного топлива с воздухом, горение полученной топливовоздушной смеси (ТВС) в широком диапазоне изменения давления и температуры. Процессы распыла, нагрева и испарения капель определяют распределение топлива в объёме зоны горения и, следовательно, влияют на характеристики КС и всего двигателя в целом. Для проектирования КС, работающих на топливе сложного химического состава (керосин различных марок), актуальной является задача разработки моделей процессов распыла топлива форсуночными устройствами, образования капель, нагрева и испарения многокомпонентных капель. Учитывая тот факт, что точный состав керосина зависит от сырья и производителя, в проектировочных расчётах используют модельные топлива (или суррогаты), которые состоят из ограниченного количества химических компонентов. Формирование суррогатов керосина со свойствами, имеющими близкие характеристики к реальному топливу, также является важной задачей исследований.

Для КС ГТД гражданского назначения, работающих на бедных предварительно перемешанных смесях (технология LPP – Lean, Premixed, Prevarorized), важным параметром является качество подготовки ТВС, которое определяется временем испарения капель топлива. Для перспективных двигателей с высокими параметрами цикла, применяющих технологию прямого распыливания в бедной смеси (LDI - Lean Direct Injection), расположение фронта пламени и характеристики процесса горения также будут определяться скоростью испарения капель топлива. Для высокофорсированных двигателей со стехиометрическими камерами сгорания, а также для форсажных камер сгорания,

габариты всего узла будут определяться временем испарения капли. Таким образом, развитие авиационных ГТД различного назначения тесно связано с процессами формирования, нагрева и испарения капель керосина, а технологии моделирования и управления этими процессами становятся критическими. В настоящее время при проектировании и доводке КС ГТД широко применяются коммерческие программные комплексы вычислительной газовой динамики (CFD), однако используемые в них подходы к моделированию нагрева и испарения основаны на упрощенных моделях отдельных процессов и не учитывают ряд важных факторов, среди которых можно выделить: 1) состав отдельных фракций в топливе и процесс их испарения; 2) неравномерность распределения параметров внутри капли (температура и доли химических компонентов); 3) диффузию компонентов в газовую фазу при наличии соседних капель. Развитие инженерного программного обеспечения зависит от понимания физических процессов, наличия апробированных подходов и моделей, а также от математического аппарата, способного решать подобные задачи. Повышение достоверности методов расчета рабочего процесса при проектировании и доводке КС ГТД за счёт использования моделей нагрева и испарения капель, учитывающих многокомпонентность топлива, диффузию компонентов внутри капли и насыщенность пара вокруг капли определяет актуальность настоящей диссертационной работы.

Степень разработанности темы. Изучением рабочего процесса в КС авиационных ГТД занимались как иностранные учёные (А.Лефевр, Т.Пуансо, Н.Рок), так и российские учёные (Ш.Пиралишвили, Б.Мингазов, А.Талантов, В.Митрофанов). Однако влияние размеров капель и их испарение на рабочий процесс КС исследовали лишь некоторые. В работах А.Лефевра, Н.Экаба, Дж.Грохманна, С.Сома, Ч.Кауфмана, И.Захматкеша и Р.Мишра показано, что уровень эмиссии вредных веществ (таких как CO, NOx, несгоревшие углеводороды и сажа) в КС зависит от размера образовавшихся капель и от времени их испарения. Также, Н.Рок, С.Вон и А.Ланский в своих работах экспериментально доказали, что процесс распыла и испарения капель топлива

существенно влияет на границу бедного срыва и неравномерность поля температуры на выходе из КС. В свою очередь, на процесс нагрева и испарения капли влияет ряд факторов, среди которых можно перечислить следующие: температура и давление окружающего газа (Дж.Чин, А.Лефевр), состав капли (Л.Поултон, А.Пинейро, М.Клингспорн, В.Ренц, В.Депредюран), теплообмен излучением (Ц.Хакенберг, Л.Домбровский). Как правило, в классических математических моделях нагрева и испарения этими параметрами пренебрегают. Исходя из этого, необходимы достоверные математические модели процессов нагрева и испарения капель при моделировании рабочего процесса в КС ГТД, учитывающие такие факторы, как многокомпонентность капли, скорость капли, насыщенность пара вокруг капли и внутреннюю диффузию компонентов. На практике при моделировании горения жидкого топлива в коммерческих программах вычислительной газовой динамики (ANSYS Fluent и других) используются упрощенные модели (диффузионные и конвективно-диффузионные), которые относятся к классическим моделям нагрева и испарения. В разработку новых математических моделей процессов нагрева и испарения капель многокомпонентных жидких топлив существенный вклад внесли такие исследователи как: С.Сажин, Г.Кастанет, Г.Коссали, А.Снегирёв, В.Третьяков. В работах С.Сажина и А.Снегирёва были разработаны модели нагрева и испарения капель, которые учитывают неравномерность распределения температуры внутри капли, диффузию компонентов внутри капли и эффект рециркуляции за счёт относительной скорости движения капли. Однако эти модели применимы к изолированным каплям, что не соответствует условиям в камерах сгорания ГТД. В работах Г.Кастанета и Г.Коссали доказано, что испарение одной капли влияет на испарение соседних капель за счёт диффузии компонентов в газовую фазу, но в настоящий момент попыток совместить эту модель с моделями С.Сажина и А.Снегирёва не было. Исходя из вышесказанного, важной задачей является совершенствование метода расчёта процессов нагрева и испарения капель жидкого топлива, включающее в себя новые математические модели нагрева и испарения для учёта таких параметров, как многокомпонентность капли, скорость

движения капли, диффузию компонентов внутри капли и насыщенность пара вокруг неё.

Цель работы: Повышение точности определения эмиссионных и эксплуатационных характеристик КС на этапе проектирования и доводки авиационных ГТД на основе разработанного метода моделирования процессов нагрева и испарения капель многокомпонентного жидкого топлива в трёхмерной постановке.

Задачи работы:

1. Разработка метода моделирования процессов нагрева и испарения капель в трёхмерной постановке, учитывающего многокомпонентный состав капли, концентрацию компонентов внутри капли, насыщенность пара вокруг капли и относительную скорость капли.

2. Формирование суррогатов многокомпонентных жидких топлив, отличающихся от существующих учётом таких свойств, как теплоёмкость, теплопроводность и давление насыщенных паров, влияющих на процессы нагрева и испарения, а также с учётом кривой дистилляции.

3. Экспериментальное исследование характеристик испарения капель многокомпонентных жидких топлив (керосина и его суррогатов). Валидация разработанного метода расчёта процессов нагрева и испарения капель многокомпонентного состава.

4. Определение характеристик камеры сгорания авиационного ГТД с использованием разработанного метода моделирования процессов нагрева и испарения многокомпонентных капель.

Объект и предмет исследования. Объект исследования – фронтные устройства камер сгорания авиационных ГТД. Предмет исследования – метод моделирования нагрева и испарения капель многокомпонентного топлива.

Научная новизна:

1. Метод моделирования процессов нагрева и испарения капель жидкого топлива в трёхмерной постановке, отличающийся комплексным учётом

многокомпонентности капель, распределения концентрации компонентов внутри капли, насыщенности пара вокруг капли и относительной скорости движения капли.

2. Новая методика формирования суррогатов углеводородных топлив, отличающаяся от существующих учётом свойств, таких как теплоёмкость, теплопроводность и давление насыщенных паров, влияющих на процессы нагрева и испарения, а также учётом кривой дистилляции.

3. Новый суррогат керосина, характеристики испарения которого соответствуют характеристикам испарения авиационного керосина с заданной точностью. Разработанный суррогат используется для моделирования рабочего процесса в КС авиационного ГТД.

4. Новые экспериментальные зависимости характеристик испарения многокомпонентных жидких топлив (керосина и его суррогатов), показывающие изменение диаметра и температуры в приповерхностном слое капли от времени.

Теоретическая и практическая значимость работы.

Теоретическая значимость работы заключается в обобщении расчётно-экспериментальных данных о времени испарения и температуре на поверхности капель керосина и его суррогатов при температурах внешней среды, характерных для рабочего процесса КС ГТД, а также в разработке метода моделирования процессов нагрева и испарения многокомпонентных капель жидкого топлива в трёхмерной постановке.

Практическая значимость работы заключается в совершенствовании алгоритма численного моделирования рабочего процесса КС ГТД за счёт использования в качестве модели керосина разработанного суррогата керосина, уточнения времени испарения многокомпонентных капель и насыщенности пара вокруг них, что позволяет повысить точность определения эмиссионных и эксплуатационных характеристик КС на этапе проектирования и доводки авиационных ГТД. Практическая значимость подтверждается актом об использовании результатов диссертационной работы на ПАО «ОДК-Кузнецов».

Результаты диссертации использовались в рамках решения задач гранта Российского научного фонда № 21–19–00876 «Разработка моделей нагрева и испарения капель суррогатов керосина», в учебном процессе путём использования разработанного методического пособия «Расчёт свойств смесевых углеводородных топлив при проектировании камер сгорания газотурбинных двигателей» для студентов и аспирантов института двигателей и энергетических установок Самарского университета им. Королева. Результаты диссертации нашли практическое применение при выполнении научно-исследовательской работы под названием «Разработка эскизной документации форсуночных устройств для генерации гетерогенных капель с оценкой влияния впрыска воды с топливом в камеру сгорания газотурбинного двигателя» совместно с Томским политехническим университетом.

Методы исследования:

1. Методы экспериментального определения времени испарения и распределения температуры внутри многокомпонентных жидких капель с помощью индуцированной лазерной фосфоресценции.
2. Методы экспериментального определения физико-химических свойств жидких топлив.
3. Методы объектно-ориентированного программирования.
4. Методы расчёта процессов нагрева и испарения капель многокомпонентных жидких топлив, основанные на аналитическом решении уравнений тепломассопереноса и диффузии компонентов внутри капли.
5. Методы трёхмерного моделирования двухфазных потоков, основанные на подходе Лагранжа.

Положения, выносимые на защиту:

1. Методика формирования суррогатов углеводородных топлив, учитывающая следующие свойства: теплоёмкость, теплопроводность и давление насыщенных паров, влияющие на процессы нагрева и испарения капель, а также кривую дистилляции.

2. Компонентный состав суррогата авиационного керосина, позволяющий имитировать характеристики испарения авиационного керосина с заданной точностью.

3. Результаты экспериментальных исследований характеристикам испарения капель керосина и его суррогатов, показывающие изменение диаметра капли от времени, а также изменение температуры в приповерхностном слое капли от времени.

4. Метод моделирования процессов нагрева и испарения капель многокомпонентного жидкого топлива в трёхмерной постановке, позволяющий уточнять время испарения капель, а также насыщенность пара вокруг них при численном моделировании рабочего процесса КС с помощью программ вычислительной газовой динамики.

Достоверность полученных результатов подтверждается:

- применением сертифицированного коммерческого программного комплекса ANSYS Fluent, верифицированного и валидированного на задачах расчета газодинамических реагирующих течений по результатам сравнения с экспериментальными данными, полученными в научно-образовательном центре газодинамических исследований Самарского университета им. Королева;

- использованием в экспериментальном исследовании аттестованного оборудования и поверенных средств измерения;

- высоким уровнем согласования результатов численного моделирования с данными, полученными в ходе экспериментальных исследований нагрева и испарения отдельных капель, а также характеристик камеры сгорания малоразмерного ГТД.

Апробация результатов исследования. Основные результаты работы докладывались на Всероссийской НТК «Процессы горения, теплообмена и экология тепловых двигателей» (Самара, 2019 г.); Международной НТК «International Conference on Aviation Motors» (ICAM 2020) (Москва, 2021 г.); Международной НТК «Проблемы и перспективы развития двигателестроения» (Самара, 2021 г.); Международном форуме двигателестроения (МФД-2022)

(Москва, 2022 г.); Международной научно-практической конференция имени Н.Д. Кузнецова «Перспективы развития двигателестроения» (Самара, 2023 г.).

Публикации. По теме диссертации опубликованы 14 работ, в том числе 1 статья в изданиях, индексируемых в ВАК, 6 статей в рецензируемых периодических изданиях, индексируемых в международных базах данных Web of Science и Scopus, 6 публикаций в материалах конференций и 1 свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

1 АНАЛИЗ СОВРЕМЕННОГО СОСТОЯНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ ПРОЦЕССОВ СМЕСЕОБРАЗОВАНИЯ В КАМЕРАХ СГОРАНИЯ АВИАЦИОННЫХ ГАЗОТУРБИННЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ

Разработка авиационного газотурбинного двигателя в настоящее время весьма трудоемкий процесс в связи с высокими требованиями по эффективности, экономичности и экологичности [8, 9, 42, 47, 50, 57, 65, 75, 76, 165]. Последнее требование связано с ужесточением норм Международной организации гражданской авиации (ИКАО) на выбросы оксидов азота (NO_x) (рисунок 1.1), а также соответствующими ограничениями по эмиссии оксида углерода (CO), несгоревших углеводородов (HC) и сажистых частиц (SN) [65, 165]. Эффективность и экономичность обеспечивается достижением оптимальных характеристик камер сгорания (КС), таких как высокая полнота сгорания, минимальная неравномерность профиля температуры на выходе из КС, минимальные потери полного давления, широкий диапазон устойчивой работы по составу топливовоздушной смеси [42, 50, 76]. Эти характеристики, которые можно называть основными, формируются вследствие сложного рабочего процесса в КС, который определяется такими явлениями, как турбулентность реагирующих потоков, способ распыливания и образования капель жидкого топлива, нагрев и испарение капель, формирование топливовоздушной смеси (ТВС), взаимодействие струй вторичного воздуха с продуктами сгорания в зоне смещения [48]. Глубокое понимание физики данных процессов необходимо для управления рабочим процессом в КС, что в последствии обеспечит выполнение требований к их основным характеристикам.

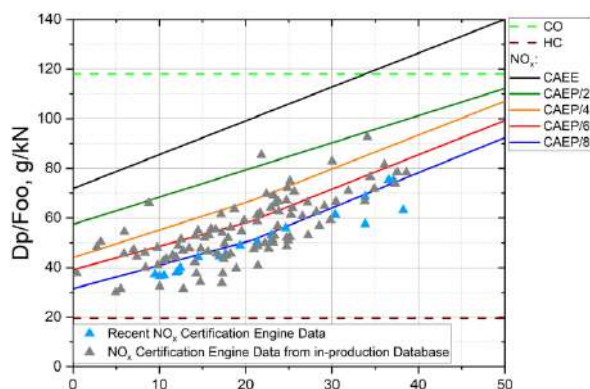


Рисунок 1.1 – Изменение норм ИКАО на выбросы оксидов азота [65]

1.1 Влияние качества распыла и испарения жидкого топлива на характеристики камеры сгорания

При использовании жидких топлив среди всех процессов, протекающих в КС, особое внимание уделяется распыливанию топлива, образованию капель, их нагреву и испарению. Именно эти процессы оказывают значительное влияние на распределение топлива в зоне горения, определяют локальные параметры потока и во многом характеристики КС. В работах [91, 120, 129, 134, 142, 148, 159, 173, 174, 191, 204, 231] представлены численные и экспериментальные исследования влияния размера капель топлива на различные характеристики горения, в том числе: выбросы (NO_x , CO , HC , сажистые частицы), неравномерность поля температуры, устойчивость пламени, температуру стенок и полноту сгорания.

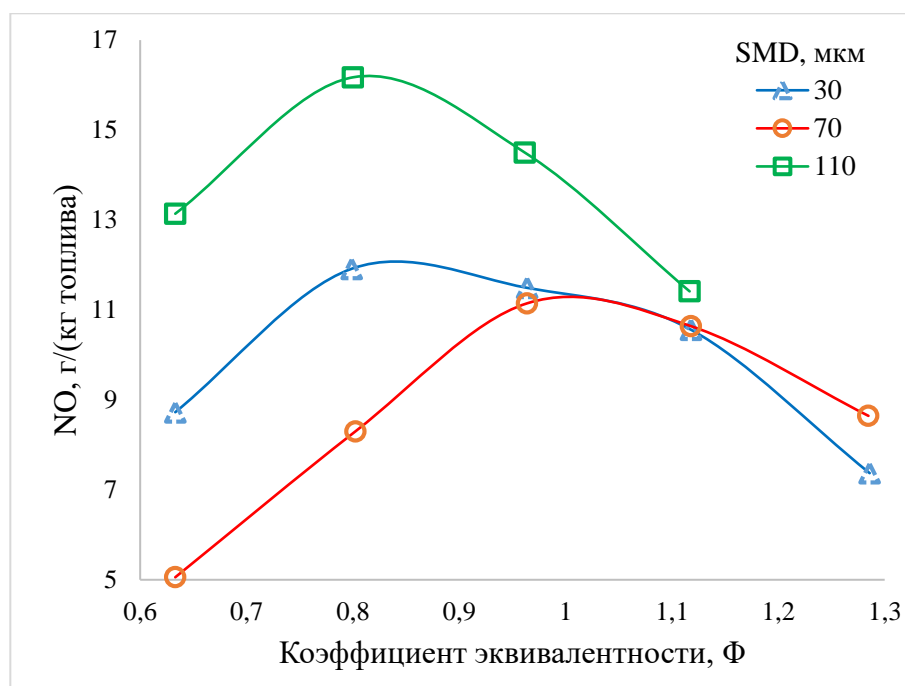
Эмиссия оксидов азота (NO_x)

Под эмиссией оксидов азота (NO_x) подразумеваются суммарные выбросы оксида азота (NO) и диоксида азота (NO_2) [57, 165]. При сжигании традиционных углеводородных топлив в высокотемпературной зоне горения в результате окисления атмосферного азота в основном образуется оксид азота (NO), который при снижении температуры продуктов сгорания в выхлопной струе двигателя может доокисляться до NO_2 . При описании закономерностей образования NO принято выделять три основных механизма [57]:

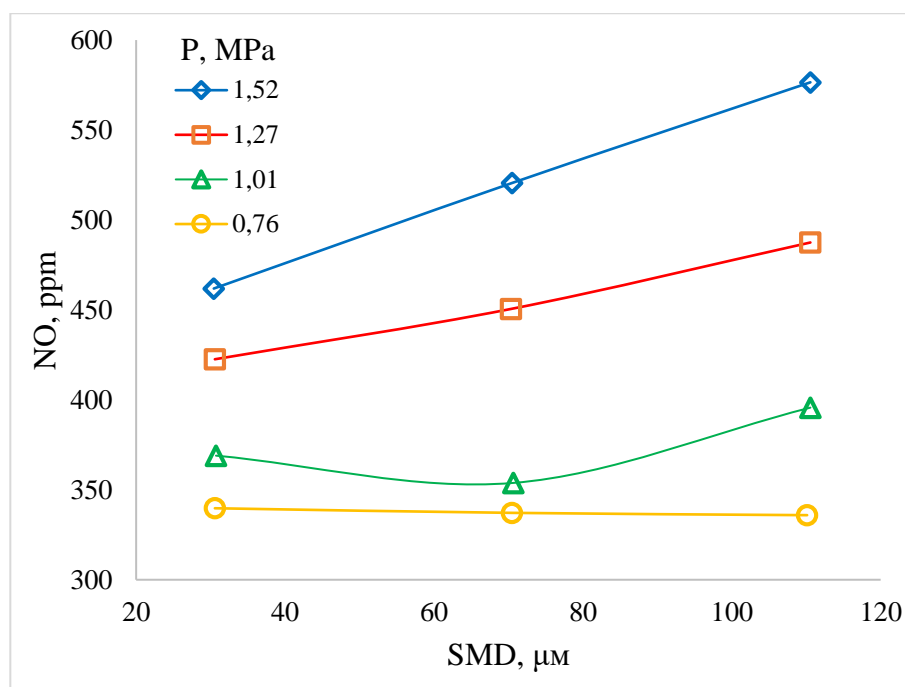
- «термический» (или механизм Зельдовича) – через непосредственное окисление атмосферного азота в высокотемпературной зоне КС при горении околостехиометрических смесей;
- «быстрый» – через взаимодействие азота с углеводородными радикалами в пламени;
- « N_2O механизм» – через реакции с образованием N_2O в качестве промежуточного механизма.

При этом для традиционных КС авиационных ГТД наибольший вклад в образование оксида азота дает «термический» механизм Зельдовича. Поэтому образование оксида азота (NO) сильно зависит от температуры пламени, которая, в свою очередь, зависит от скорости испарения капель топлива и характеристик

их горения. В исследованиях А. Лефевра и Д. Баллал [165], Нура Салех Экааб [129], Д. Грохманн и др. [142], Н. Шарма и С. Сом [204], К. Ринка и А. Лефевра [191] показано (рисунок 1.2), что выбросы NO изменяются в несколько раз при изменении среднего диаметра капель по Заутеру (Sauter Mean Diameter – SMD) от 30 до 110 мкм. Это объясняется образованием «оболочек пламени» вокруг самых крупных капель, которые горят в диффузионном режиме при близких к стехиометрическим соотношениям топливо/воздух, образуя множество локальных областей высокой температуры [165]. Следует отметить, что в зарубежной литературе используется так называемый коэффициент эквивалентности Φ , который равен отношению стехиометрического коэффициента избытка воздуха к реальному коэффициенту избытка воздуха смеси [165].



а)



б)

Рисунок 1.2 – Влияние SMD на эмиссии оксидов азота:

а) А.Х. Лефевр и Д.Р. Баллал [165]; б) К.К. Ринк и А.Х. Лефевр [191]

С другой стороны, Р. Мишра и С. Чандел [174] в своей работе обнаружили, что при высоких значениях коэффициента эквивалентности в первичной зоне образование NO увеличивалось при снижении SMD, поскольку мелкие капли топлива приводят к быстрому сгоранию и более высокой температуре пламени, а при очень высоких коэффициентах избытка воздуха и при наличии больших капель уменьшается образование NO, так как скорость испарения в этом случае более важна (рисунок 1.3).

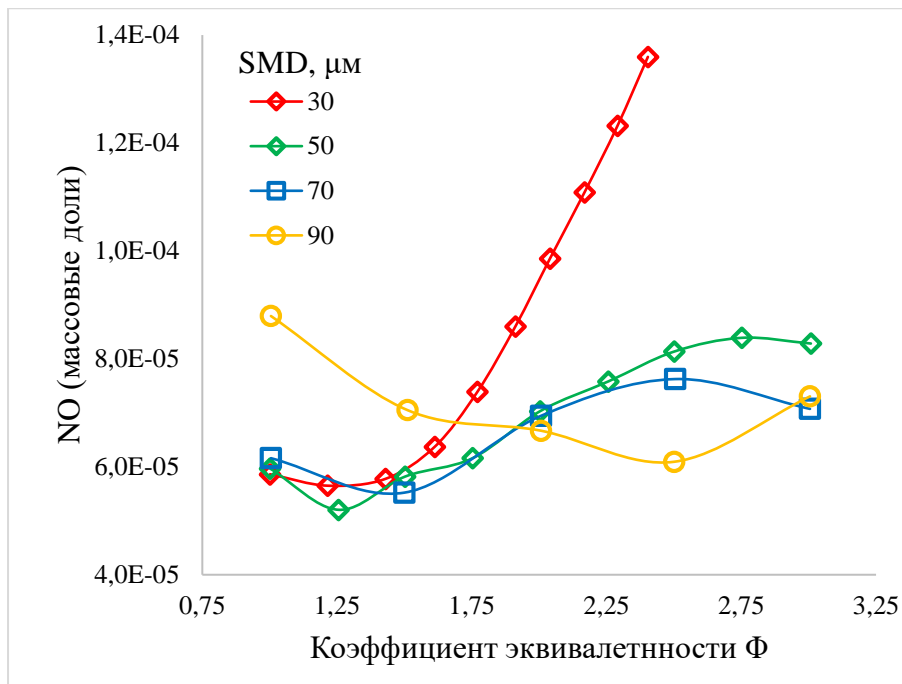
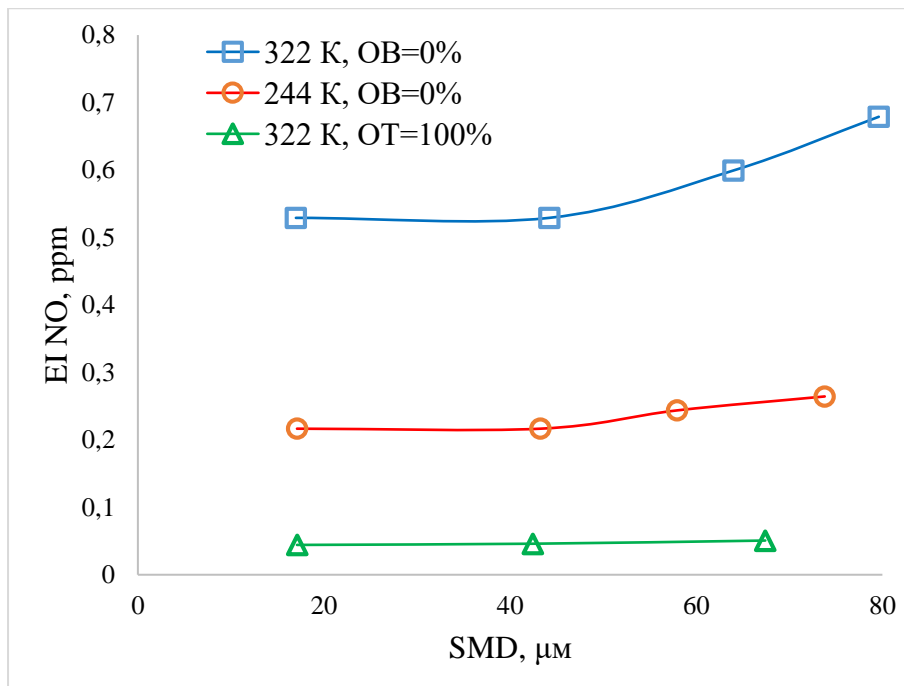
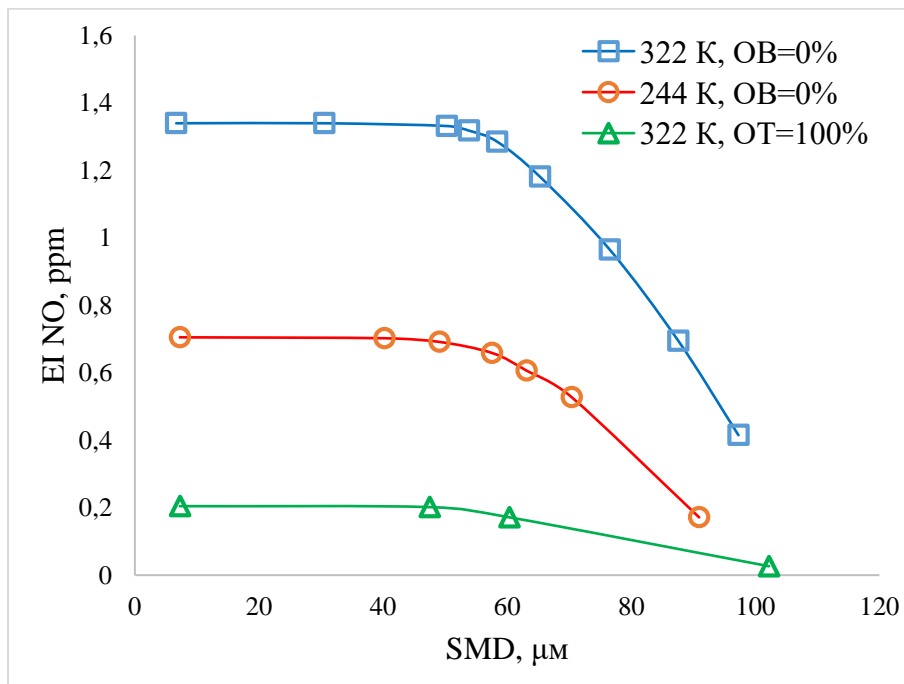


Рисунок 1.3 – Влияние коэффициента избытка воздуха в первичной зоне горения и SMD на распределение NO на выходе из КС (Р.К. Мишра и С. Чандель [174])

Однако в работе К.В. Кауфман и др. [159] показана противоположная тенденция: при высоких коэффициентах избытка воздуха в первичной зоне увеличение SMD привело к увеличению выброса NO из-за снижения скорости испарения, приводящего первичную зону к стехиометрическому состоянию с последующим повышением температуры (рисунок 1.4а). При этом при близком к стехиометрическому коэффициенту избытка воздуха выбросы NO уменьшались при увеличении SMD, поскольку замедленное испарение привело к обеднению первичной зоны и снижению температуры пламени (рисунок 1.5б).



а)



б)

Рисунок 1.4 – Влияние SMD на эмиссию NO в КС:

а) с богатой первичной зоной горения; б) с близкой к стехиометрической первичной зоной горения (К.В. Кауфман и др. [159])

Это говорит о том, что помимо осреднённого коэффициента избытка воздуха, на образование NO_x существенное влияние оказывает локальное

значение концентрации топлива, которое определяется размером капель и скоростью их испарения.

Эмиссия оксидов углерода (CO)

Образование CO в КС в основном определяются двумя различными факторами: при работе в условиях богатых и сильно обеднённых смесей образуется большое количество CO из-за неполного сгорания топлива, но, с другой стороны, при работе на стехиометрическом режиме или близким к нему значительное количество CO образуется за счет диссоциации CO₂ [165]. Тогда влияние параметров распыления на выбросы CO будет зависеть от этих двух различных эффектов.

В своих работах А. Лефевр и Д. Баллал [165], Нура Салех Эжааб [129] обнаружили, что выбросы CO увеличиваются при увеличении SMD из-за плохого смешивания топлива и воздуха, что способствует неполному сгоранию (рисунок 1.5).

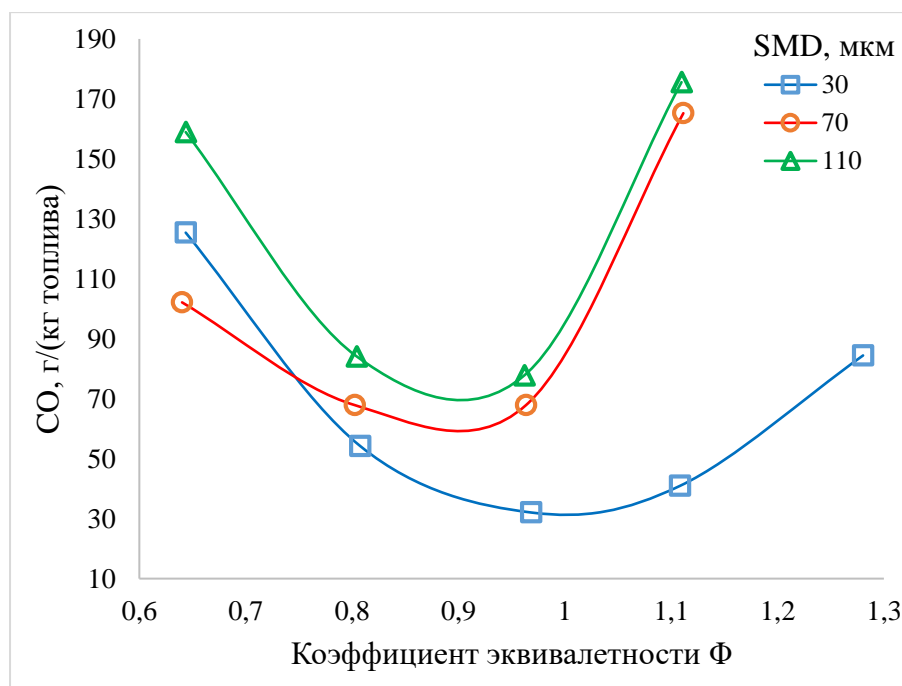


Рисунок 1.5 – Влияние SMD на эмиссию оксидов углерода
(А.Х. Лефевр и Д.Р. Баллал [165])

С другой стороны, Р.К. Мишра и С. Чандел [174] в своей работе обнаружили, что при очень высоких коэффициентах избытка воздуха в первичной

зоне (до $\alpha=3$) выбросы CO увеличиваются при уменьшении SMD из-за более высокой температуры пламени, что способствует диссоциации CO₂.

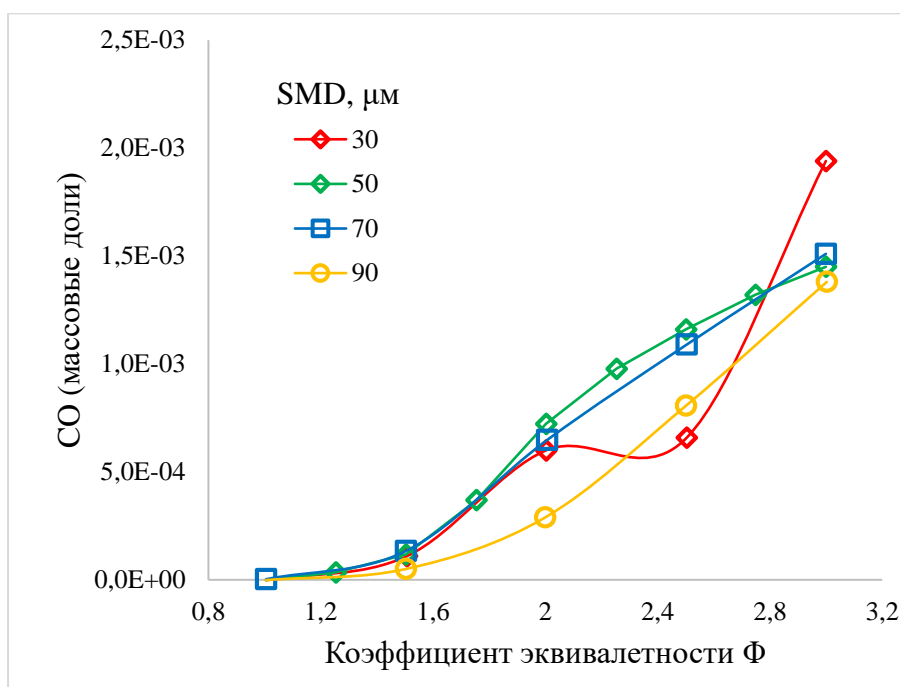
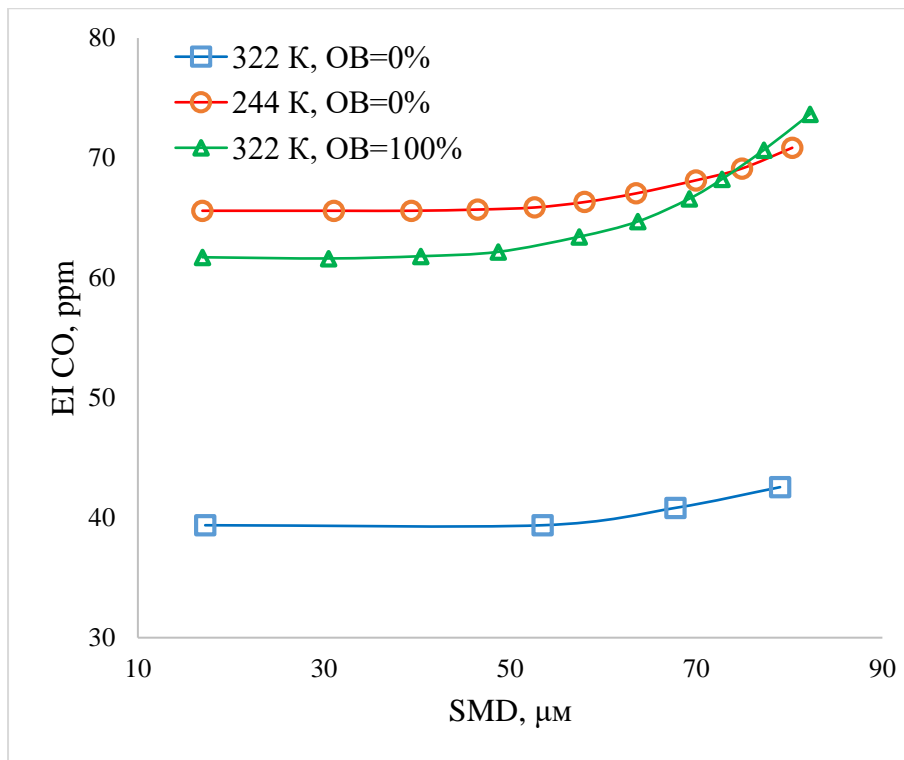
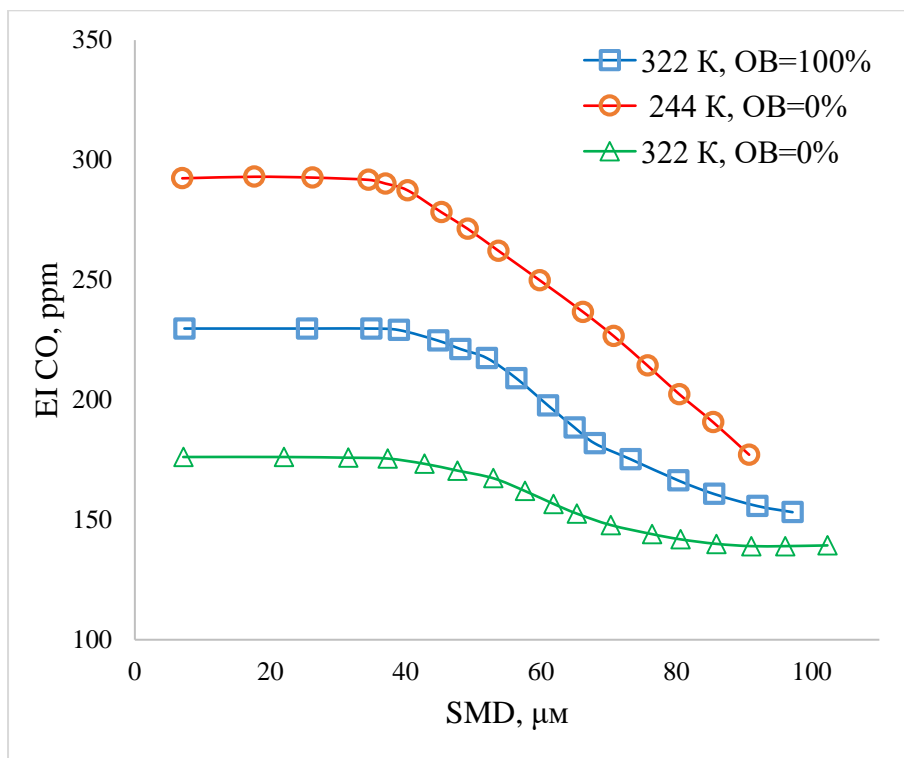


Рисунок 1.6 – Влияние коэффициента избытка воздуха в первичной зоне горения и SMD на распределение CO на выходе из КС (Р.К. Мишра и С. Чандель [174])

Однако, как и в случае с выбросами NO_x, в работе К.В. Кауфман и др. [159] показана обратная тенденция: при высоких коэффициентах избытка воздуха в первичной зоне горения увеличение SMD приводит к увеличению выбросов CO (рисунок 1.7а), в то время как при близком к стехиометрическому коэффициенте избытка воздуха выбросы CO снижаются при увеличении SMD (рисунок 1.7б). Таким образом, локальные значения концентрации топлива также будут существенно влиять на образование CO, как и на образование оксидов азота.



а)



б)

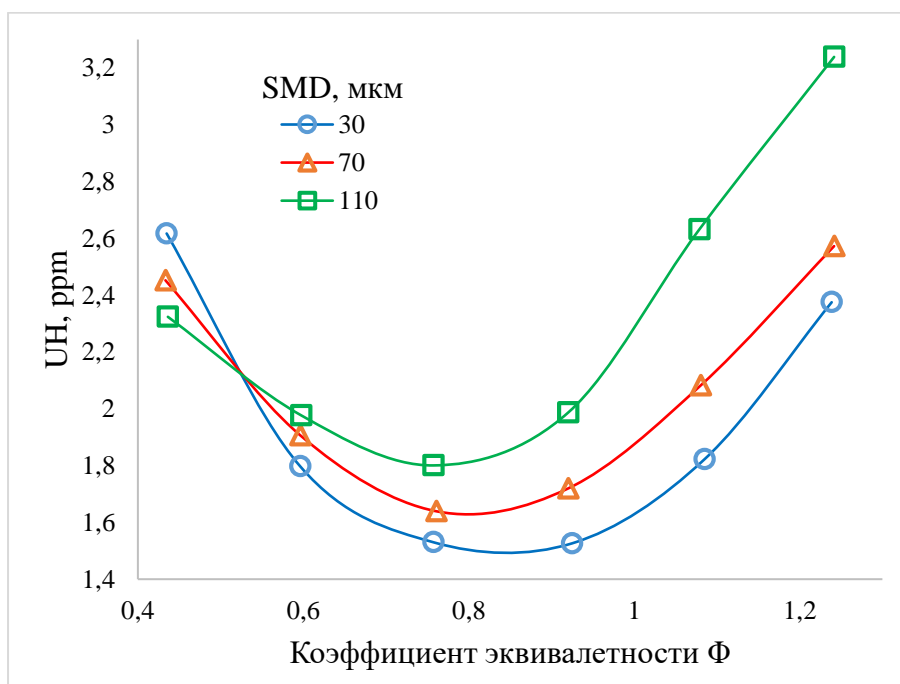
Рисунок 1.7 – Влияние SMD на эмиссии CO в КС:

а) с богатой первичной зоной горения; б) с близкой к стехиометрической первичной зоной горения (К.В. Кауфман и др. [159])

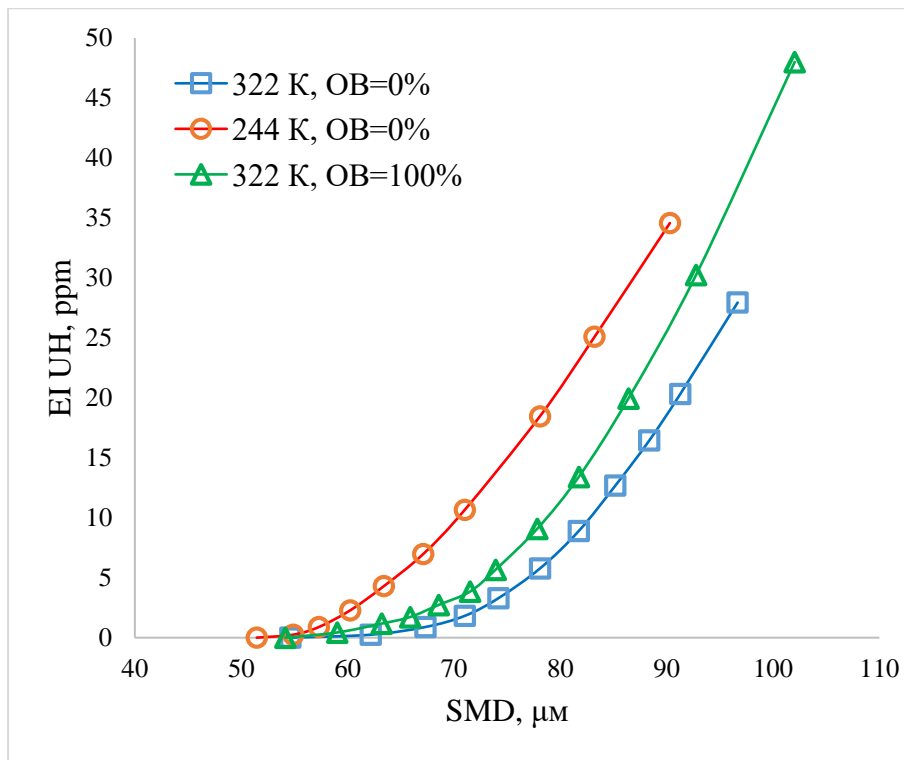
Несгоревшие углеводороды (НС)

К несгоревшим углеводородам относится топливо, полученное на выходе из КС в виде капель или паров, а также продукты термического разложения исходного топлива на более низкомолекулярные компоненты [165]. Несгоревшие углеводороды НС образуются в результате плохого распыления, а также при горении богатых смесей или бедных смесей при недостаточном времени пребывания.

Согласно работам А. Лефевра и Д. Баллала [165], К.В. Кауфмана и др. [159] выбросы НС увеличиваются при увеличении SMD в результате ухудшения смешения топлива и воздуха, что приводит к неполному сгоранию (рисунок 1.8). Тогда как в работе Р.К. Мишра и С. Чандел [174] показано противоположное влияние для богатых смесей, то есть выбросы НС больше при уменьшении SMD, за исключением очень малых размеров капель топлива (рисунок 1.9).



а)



б)

Рисунок 1.8 – Влияние SMD на эмиссию НС:

а) А. Лефевр и Д. Баллал [165]; б) К.В. Кауфман и др. [159]

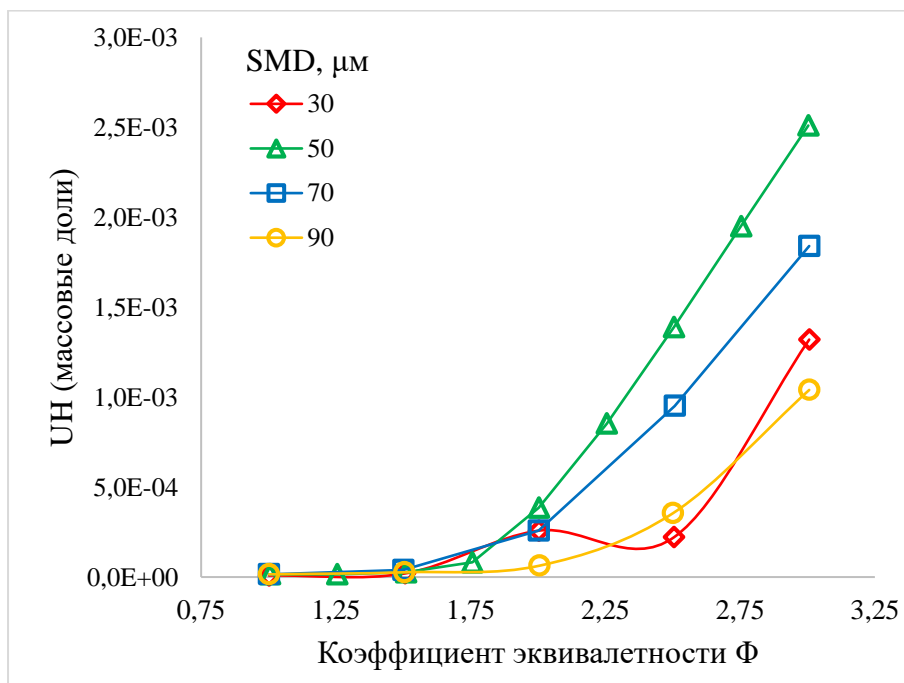


Рисунок 1.9 – Влияние коэффициента избытка воздуха в первичной зоне горения и SMD на распределение НС на выходе из КС (Р.К. Мишра и С. Чандель [174])

Сажа

Сажа, присутствующая в выхлопных газах КС, состоит в основном из углерода (~96%) и смеси водорода, кислорода и других элементов. Сажа образуется в первичной зоне и расходуется в областях высоких температур ниже по потоку (промежуточная зона, а на современных высокотемпературных двигателях – зона разбавления) [165].

Как и в случае других вредных веществ, исследования, проведенные для изучения влияния SMD на выбросы сажи, показывают противоположные эффекты. Некоторые авторы, такие как А. Лефевр и Д. Баллал [165], Нура Салех Экааб [129], И. Захматкеш и М. Могиман [231], а также Д. Хаяши и др. [148] обнаружили в своих работах увеличение выбросов сажи при увеличении SMD. Это объясняется тем, что более мелкие капли топлива полностью испаряются перед фронтом пламени и сгорают с предварительным смешением, в то время как крупные капли полностью не испаряются до фронта пламени, сгорая при богатом диффузионном режиме (рисунок 1.10-1.11).

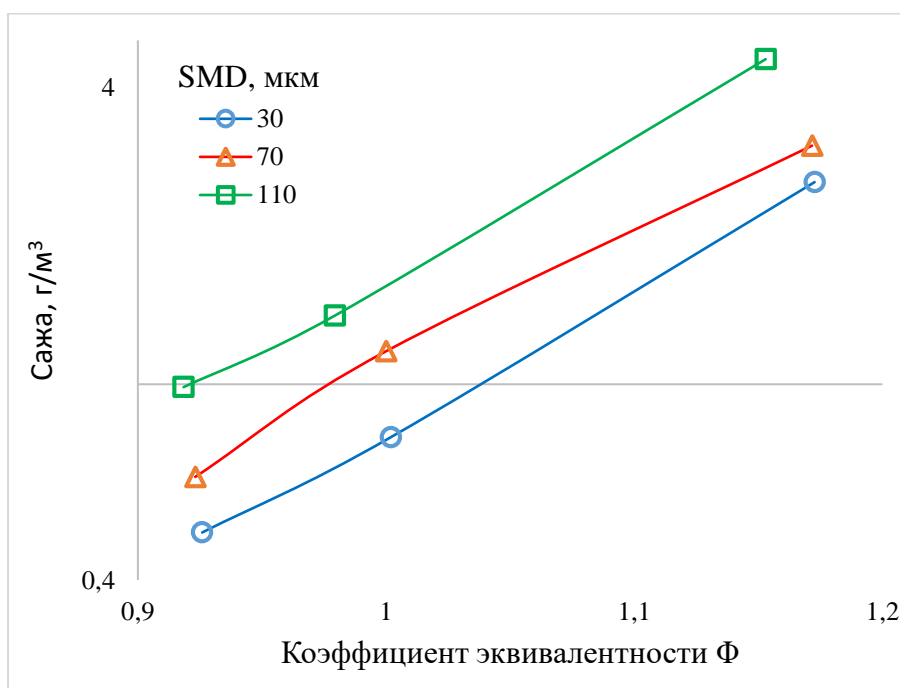


Рисунок 1.10 – Влияние SMD на эмиссии сажи (А.Х. Лефевр и Д.Р. Баллал [165])

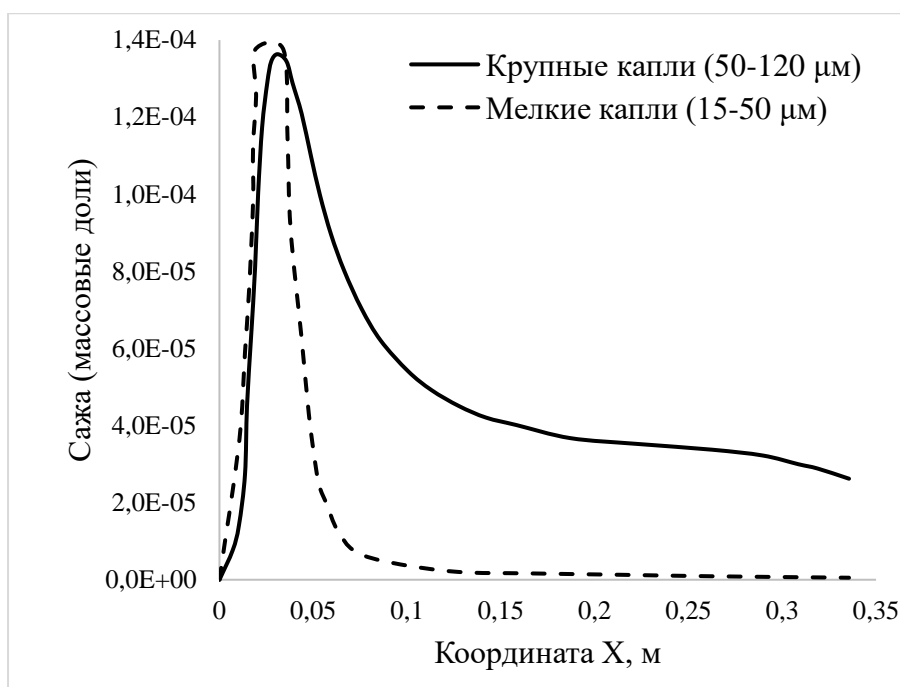


Рисунок 1.11 – Осевое распределение массовой доли сажи в КС для двух значений SMD (И. Захматкеш и М. Могиман [231])

Однако это же явление используют и другие авторы, например Р.К. Мишра и С. Чандел [174] или А. Гасеми и др. [134] для объяснения своих результатов, в которых был показан противоположный эффект, а именно уменьшение выбросов сажи с увеличением SMD (рисунок 1.12–1.13). Эти противоположные эффекты, объясняемые одной и той же причиной, затрудняют понимание реального влияния SMD на образование сажи.

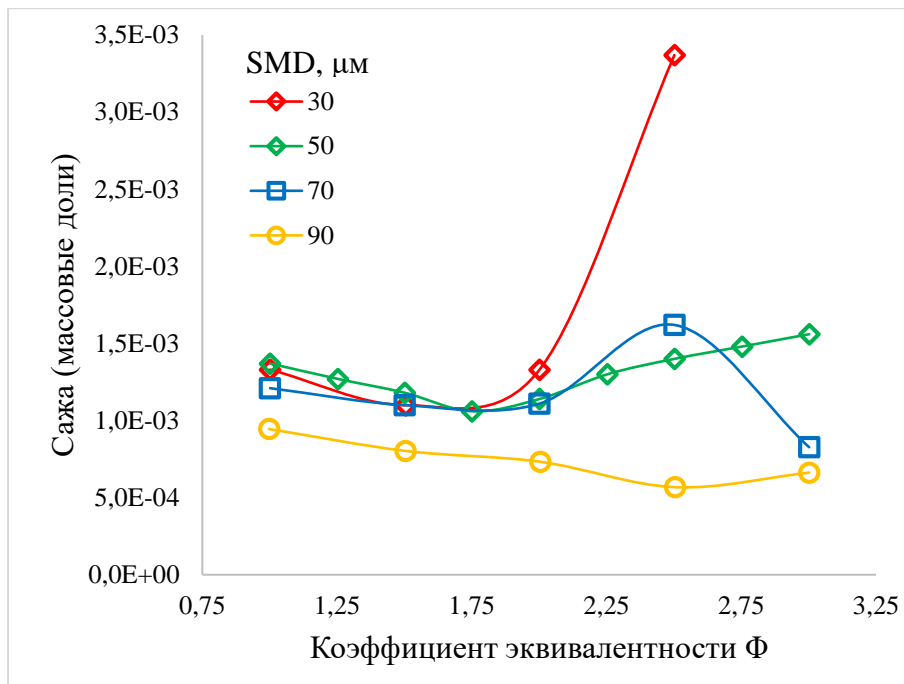


Рисунок 1.12 – Влияние коэффициента избытка воздуха в первичной зоне горения и SMD на уровень массовой доли сажи на выходе из КС (Р.К. Мишра и С. Чандель [174])

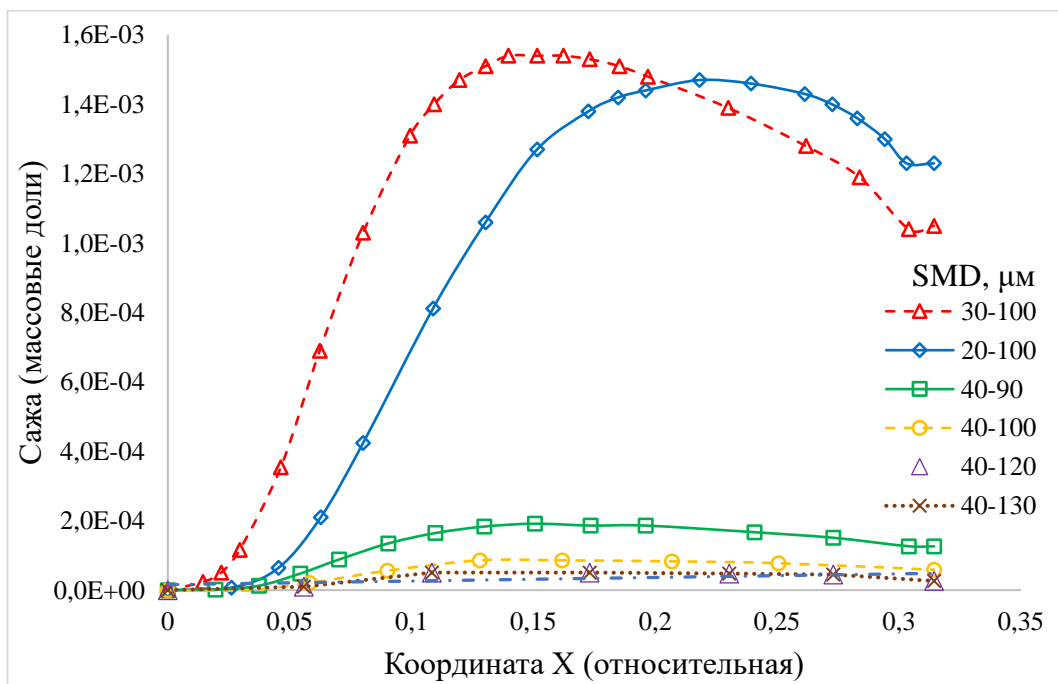


Рисунок 1.13 – Осевое распределение массовой доли сажи вдоль КС для разных значений SMD (А. Гасеми и др. [134])

Неравномерность поля температуры

Степень неравномерности является мерой однородности температуры на выходе из КС. Обычно определяется как

$$\theta = \frac{T_{\max} - T_{\Gamma}}{T_{\Gamma} - T_{\text{К}}}, \quad (1.1)$$

где T_{\max} – максимальная температура на выходе из КС, $T_{\text{К}}$ – средняя температура воздуха на входе в КС, а T_{Γ} – средняя температура на выходе из КС [2].

Степень неравномерности улучшается, т.е. уменьшается значение коэффициента θ за счет увеличения SMD топливной форсунки, согласно исследованиям, проведенным Р.К. Мишра и др. [173], А. Датта и С.К. Сом [119], Н.Ю. Шарма и С.К. Сом [204]. Это объясняется тем, что при увеличении SMD капли топлива имеют тенденцию рассеиваться за пределами первичной зоны, где низкая температура делает горение менее благоприятным (рисунок 1.14).

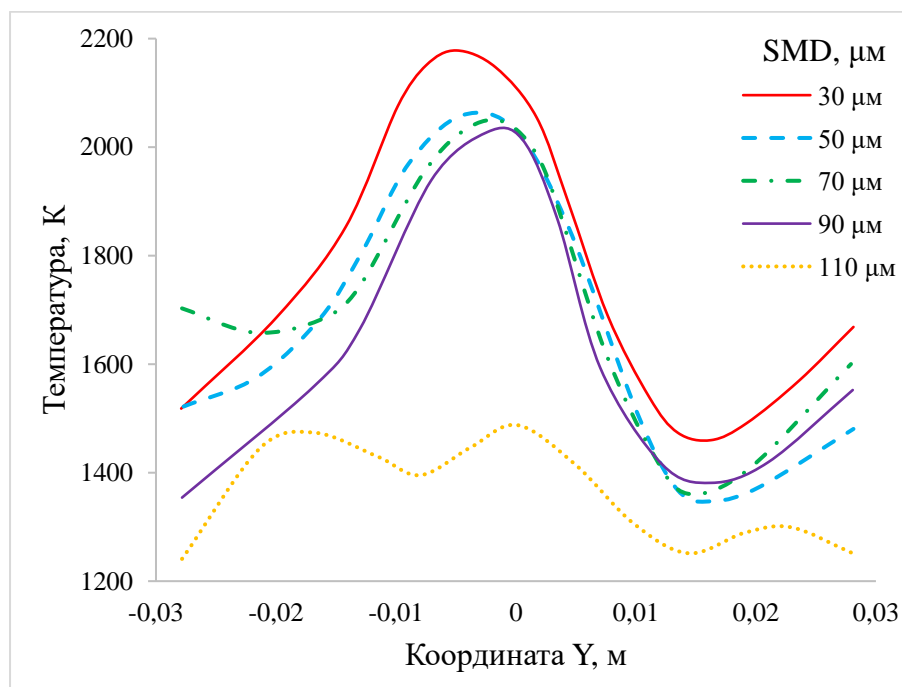


Рисунок 1.14 – Влияние SMD на радиальный профиль осредненной по окружности температуры на выходе из КС (Р.К. Мишра и др. [173])

Устойчивость работы КС

Одним из наиболее важных требований к КС ГТД является то, что горение должно поддерживаться в широком диапазоне рабочих условий, особенно в авиационных КС, которые должны работать при низких температурах и давлениях, а также при соотношениях топливо/воздух, которые лежат за пределами обычных пределов воспламеняемости для смесей углеводородов с воздухом [42, 165].

Р. Алсуламия и др. [91] было проведено экспериментальное исследование влияния качества распыливания топлива на стабильность пламени с использованием кольцевой топливной форсунки. Они обнаружили, что увеличение SMD способствует увеличению стабильности горения, потому что, несмотря на то, что более крупные капли медленнее испаряются, они могут создавать локальные богатые области и повышенные температуры, которые стабилизируют пламя.

С другой стороны, в работе Р.К. Мишра и др. [173], где была разработана численная модель всей КС, показан обратный эффект, то есть устойчивость пламени снижалась при увеличении SMD (рисунок 1.15). Это связано с тем, что увеличение SMD задерживает воспламенение, поскольку оно происходит ближе к первичным отверстиям для забора воздуха, что оказывает гасящее влияние на существующее температурное поле, поскольку этот эффект, по-видимому, более важен, чем создание локальной богатой области с более крупными каплями.

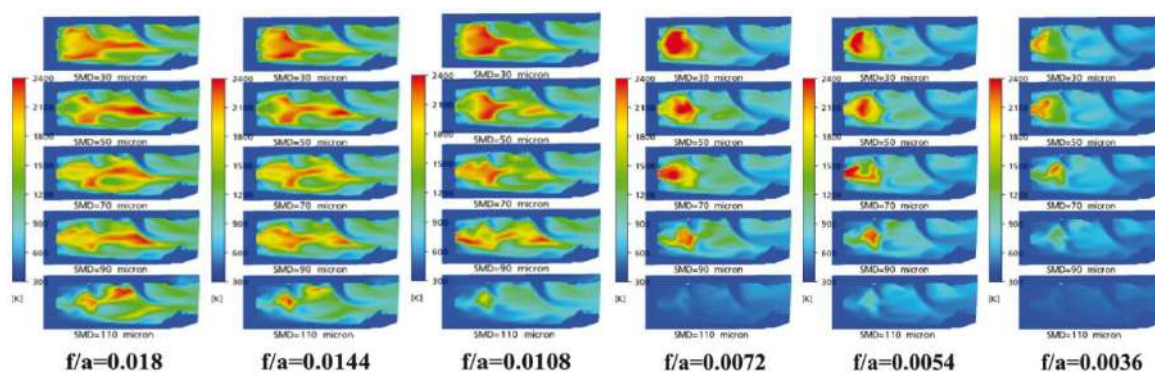


Рисунок 1.15 – Распределение температуры в плоскости x-z в продольном сечении КС, проходящей через осевую линию форсунки, для различных соотношений топлива и воздуха и SMD (Р.К. Мишра и др. [173])

Эффективность горения

Эффективность горения оценивается коэффициентом полноты сгорания топлива η_g , который представляет собой отношение количества тепла, выделившегося при сгорании единицы массы топлива, к его теплотворной способности [22]. Как указывали А. Датта и С. Сом [119], при заданном расходе топлива полнота сгорания может быть рассчитана как концентрация паров топлива на выходе из КС и зависит в основном от скорости испарения капель

топлива и смешивания паров топлива в несущей фазе, что, в свою очередь, зависит от диаметра капель и их характеристик проникновения и рассеивания в газофазной среде.

Согласно исследованиям А. Датты и С.К. Сом [119], а также Н. Шарма и С.Сом [204] полнота сгорания увеличивается при увеличении SMD, пока не достигает максимума при оптимальном значении SMD, а затем начинает снижаться при более высоких значениях SMD. Это связано с тем, что рост SMD увеличивает проникновение капель, что повышает эффективность сгорания, но если SMD продолжает увеличиваться, то это вызывает плохое испарение и более длительное проникновение крупных капель, что снижает эффективность горения.

Результаты исследований различных авторов по влиянию размеров капель на характеристики горения обобщены в таблице 1.1. Одни характеристики улучшаются при увеличении SMD, а другие ухудшаются, что свидетельствует о существовании их оптимальных значений, допускающих компромиссное решение для всех характеристик горения. Кроме того, влияние SMD на выбросы, полноту сгорания и устойчивость пламени различается в разных исследованиях, что позволяет предположить, что это влияние зависит также от процессов нагрева и испарения капель, а также и от других характеристик горения.

Таблица 1.1 Влияние SMD на характеристики горения

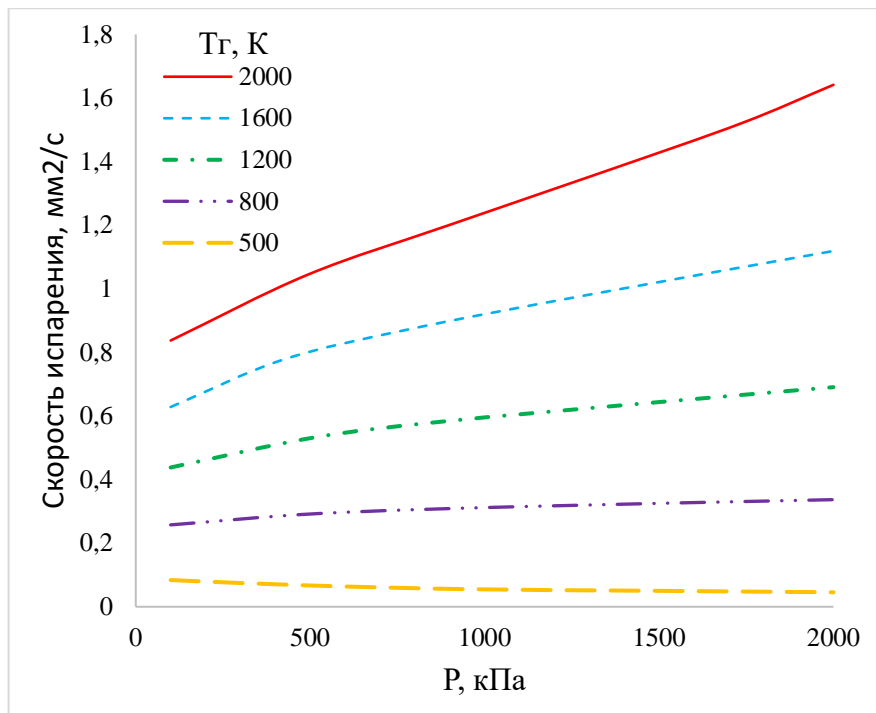
Характеристика	SMD ↑	
	NO _x	↑
↓		[159] [174]
CO	↑	[129] [159] [165]
	↓	[159] [174]
УНС	↑	[159] [174]
	↓	[174]
Сажа	↑	[129] [148] [165] [231]
	↓	[134] [174]
Степень неравномерности профиля температур	↓	[119] [173] [204]
Устойчивость пламени	↑	[91]
	↓	[173]
Полнота сгорания	↑ ... ↓	[119] [204]

1.2 Влияние различных параметров на характеристики испарения капель

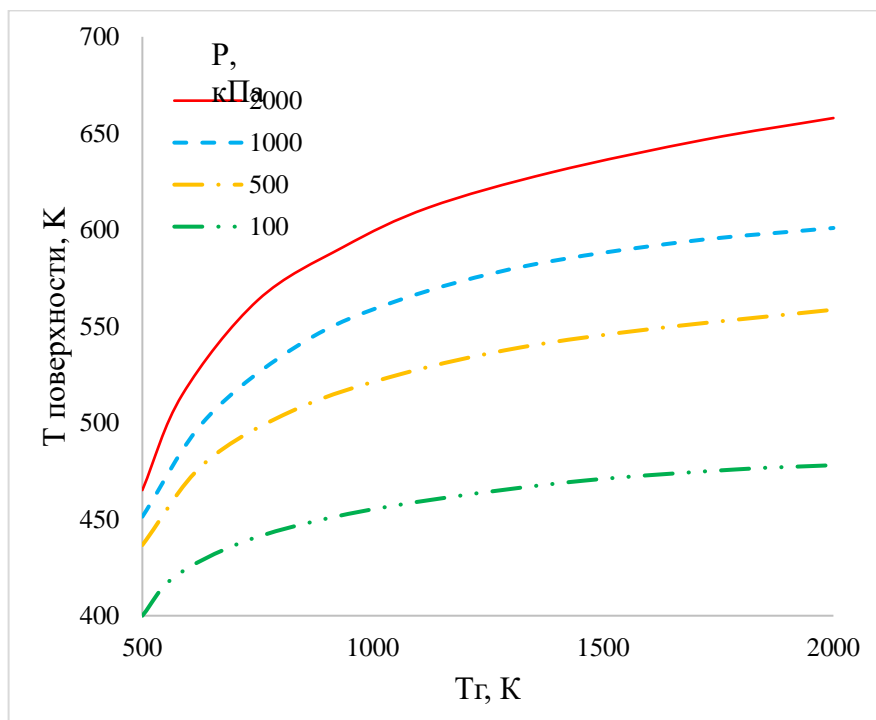
Из раздела 1.1 видно, что значительное влияние на основные характеристики горения в КС ГТД оказывают размер капель (SMD), а также время и температура испарения капель. Модели, используемые для расчёта процессов испарения капель на этапе проектирования КС должны с высокой точностью определять эти характеристики для правильного прогнозирования процессов смесеобразования, которые определяют распределение локальных параметров топливовоздушной смеси по объёму камеры сгорания. Такие локальные параметры ТВС, как соотношение воздух/топливо (характеризуется местным значением коэффициента избытка воздуха, α), степень испарения жидкого топлива, SMD неиспаренных капель, температуру определяют в конечном итоге параметры рабочего процесса и основные характеристики КС. Очевидно, что на процесс испарения влияют различные факторы. Теоретические и экспериментальные исследования, представленные в работах [63, 64, 109, 121, 123, 161, 163, 182, 185] показывают, что на процесс испарения влияют такие факторы, как температура и давление газа вокруг капли, состав капли, относительная скорость движения капли в газовой среде, насыщенность пара вокруг капель и т.п. Рассмотрим влияние каждого из перечисленных параметров на характеристики испарения капель.

Температура и давление окружающего газа

Дж. Чин и А. Лефевр [109] провели исследование влияния температуры и давления газа на время испарения и изменение температуры на поверхности капли для различных видов топлив. В работе показано, что изменение скорости испарения от давления растёт интенсивнее при высоких давлениях, чем при низких (рисунок 1.16а). При высоких температурах газа зависимость температуры на поверхности капли от давления положительная, а при низких температурах – отрицательная (рисунок 1.16б).



а)



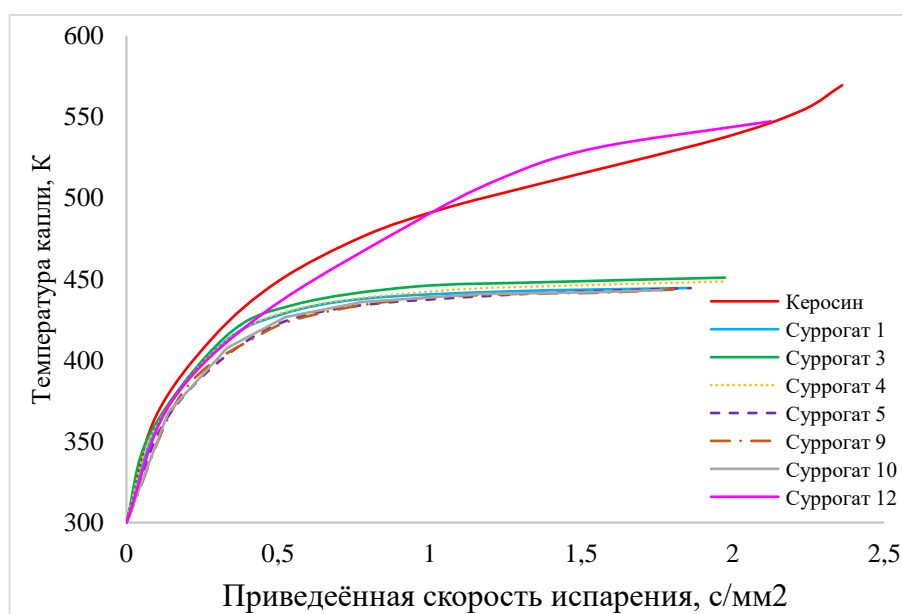
б)

Рисунок 1.16 – Влияние температуры и давления окружающего газа на характеристики испарения топлива JP-5:

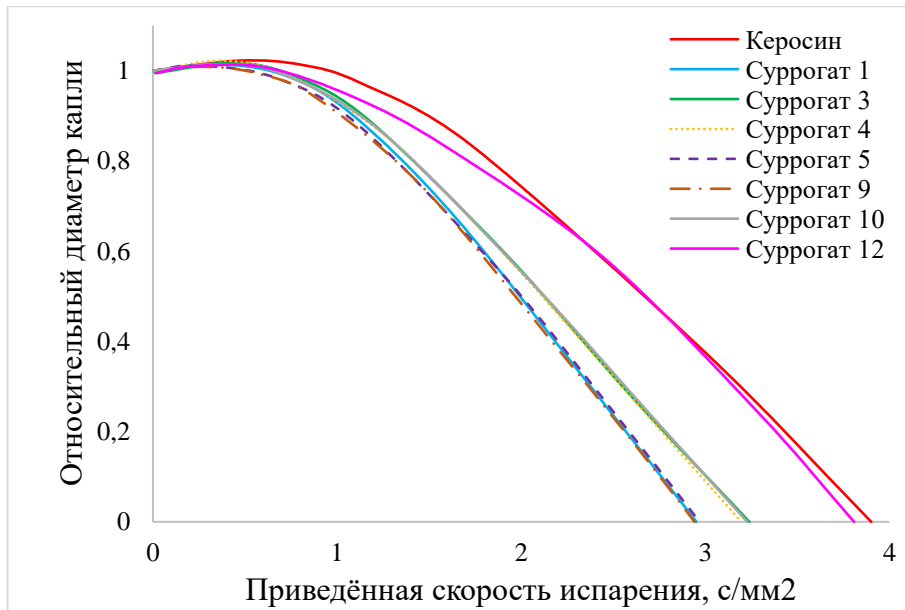
а) на скорость испарения капель; б) на температуру на поверхности капель
(Дж. С. Чин и А. Х. Лефевр [109])

Состав капли

Влияние состава капли на характеристики испарения изучалось различными группами авторов [121, 161, 182, 185]. Были исследованы однокомпонентные, двухкомпонентные и многокомпонентные капли. В работе Л. Поултон и др. [185] проведено исследование характеристик испарения для капель керосина и его суррогатов. Количество компонентов изменялось от одного до шести. Видно, что однокомпонентные и двухкомпонентные смеси имеют более низкую температуру испарения (рисунок 1.17а), а также испаряются быстрее (рисунок 1.17б). В среднем однокомпонентные смеси испаряются на 25% быстрее, чем многокомпонентные. Температура полного испарения для многокомпонентных смесей достигает 570-580 К, в то время как температура полного испарения для однокомпонентных капель не превышает 440-450 К (ниже на 30%). Трёх- и более компонентные составы имеют температуру и время испарения близкие к характеристикам испарения керосина. Аналогичные результаты были получены в работе А.П. Пинеиро и др. [182], в которой были исследованы смеси с количеством компонентов от одного до девяти (рисунок 1.18).



а)

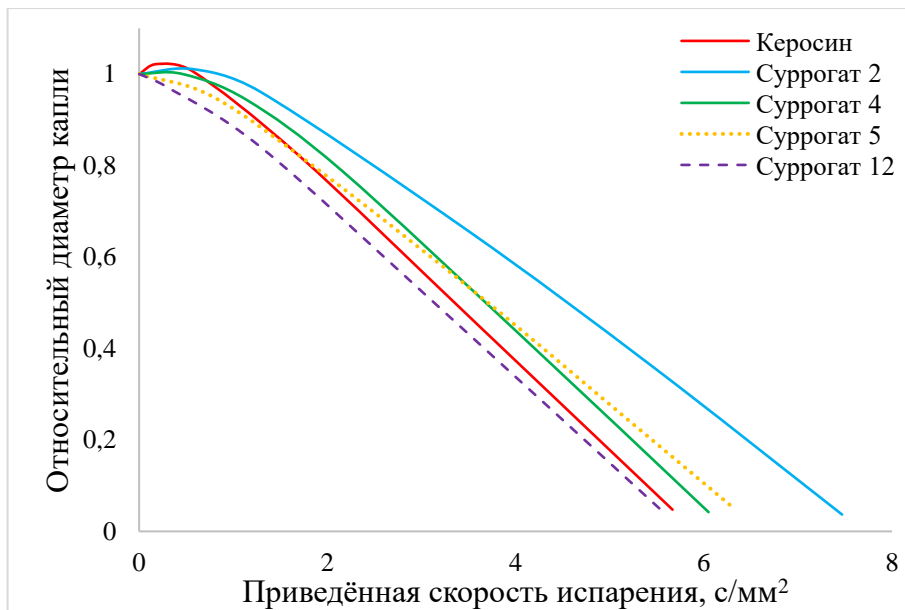


б)

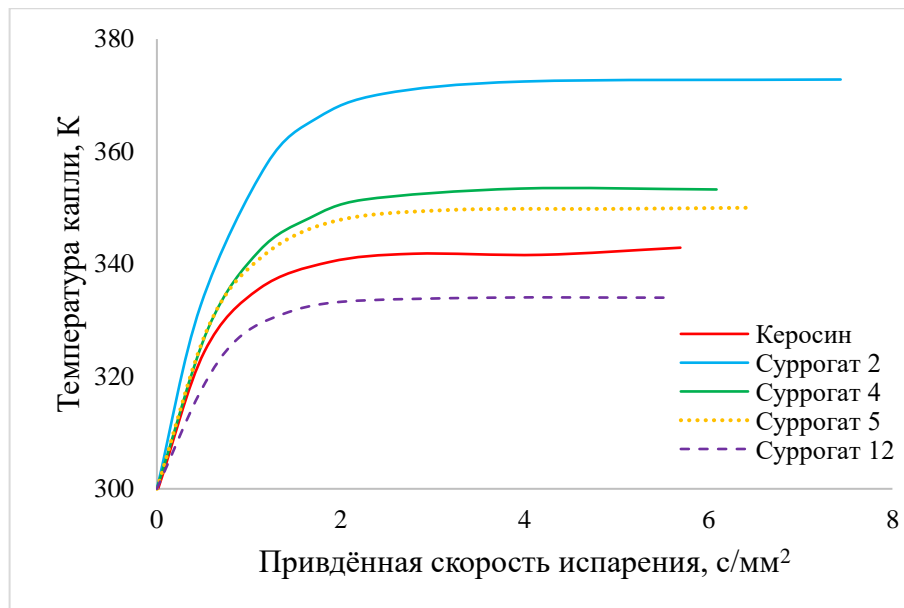
Рисунок 1.17 – Изменение характеристик испарения в зависимости от времени для керосина и его суррогатов:

а) температура на поверхности капли; б) изменение диаметра капли

(Л. Поултон и др. [185])



а)



б)

Рисунок 1.18 – Изменение характеристик испарения в зависимости от времени для керосина и его суррогатов:

а) изменение диаметра капли; б) температура на поверхности капли

(А.П. Пинейро и др. [182])

В работе М. Клиггспорн и У. Ренц [161] показано изменение характеристик испарения для однокомпонентных капель и бинарных смесей. Видно, что характеристики испарения сильно отличаются для однокомпонентных капель и для бинарных смесей. Время испарения для чистого декана в 1,6 раза больше, чем для бинарной смеси гептан/декан (50/50 по объёму) (рисунок 1.19). Полное испарение для декана достигается при 540 К, в то время как смесь гептан/декан испаряется при 620 К, на 15% выше чем для чистого декана (рисунок 1.20).

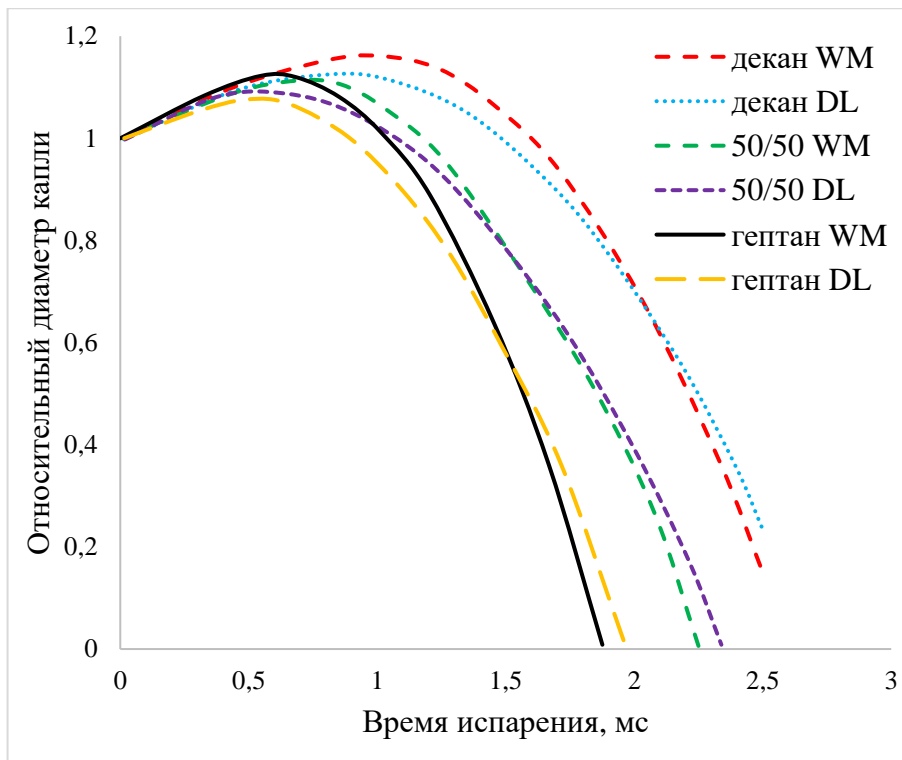
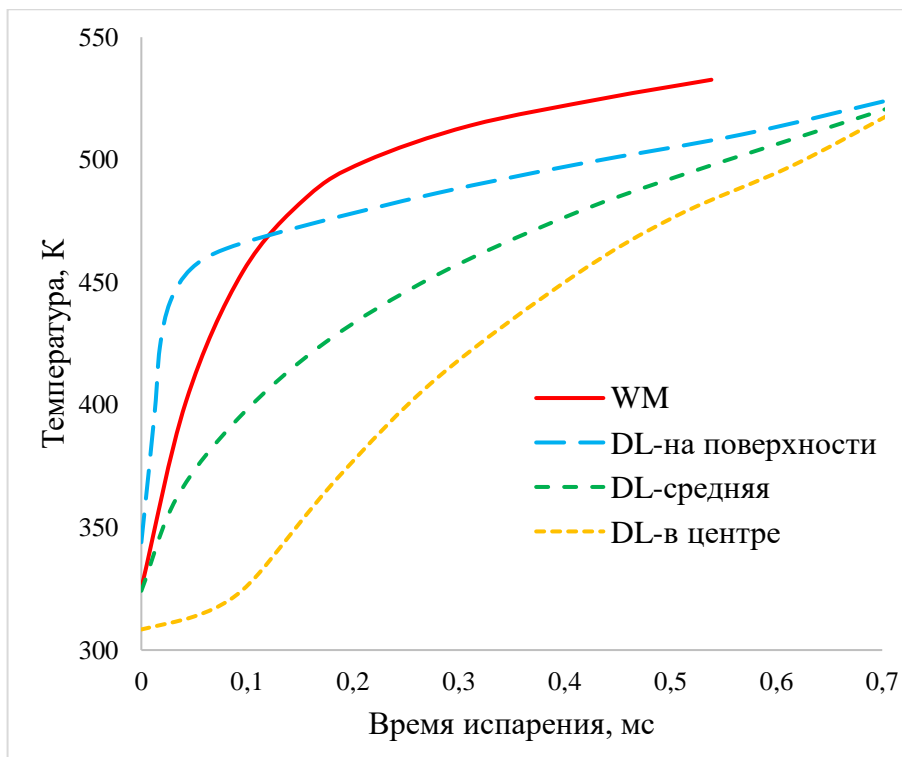
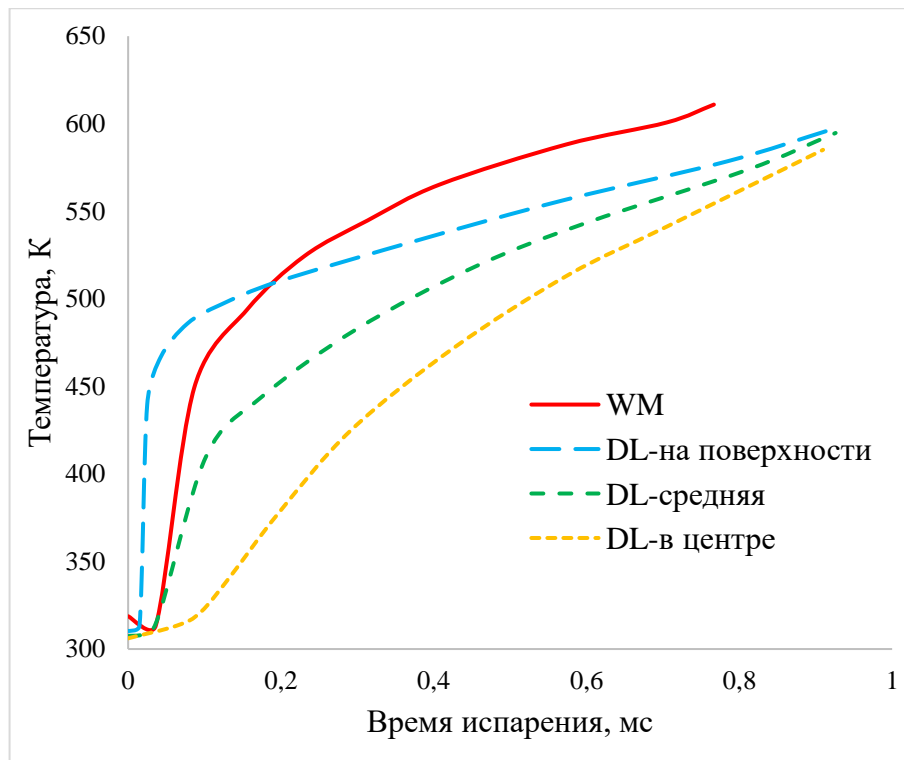


Рисунок 1.19 – Влияние состава капли на изменение диаметра капли во времени для различных смесей: 1 – чистый гептан, 2 – чистый декан, 3 – смесь гептан/декан (50/50 по объему) (М. Клингспорн и У. Ренц [161])



а)



б)

Рисунок 1.20 – Влияние состава капли на температуру на поверхности капли во времени для различных смесей:

а) чистый гептан; б) смесь гептан/декан (50/50 по объему)

(М. Клингспорн и У. Ренц [161])

В. Депредюран и др. [121] провели исследование изменения диаметра однокомпонентных капель, из которого следует, что при одинаковых условиях отдельные компоненты испаряются по-разному: самые тяжелые компоненты испаряются дольше, и их диаметр уменьшается медленнее (рисунок 1.21).

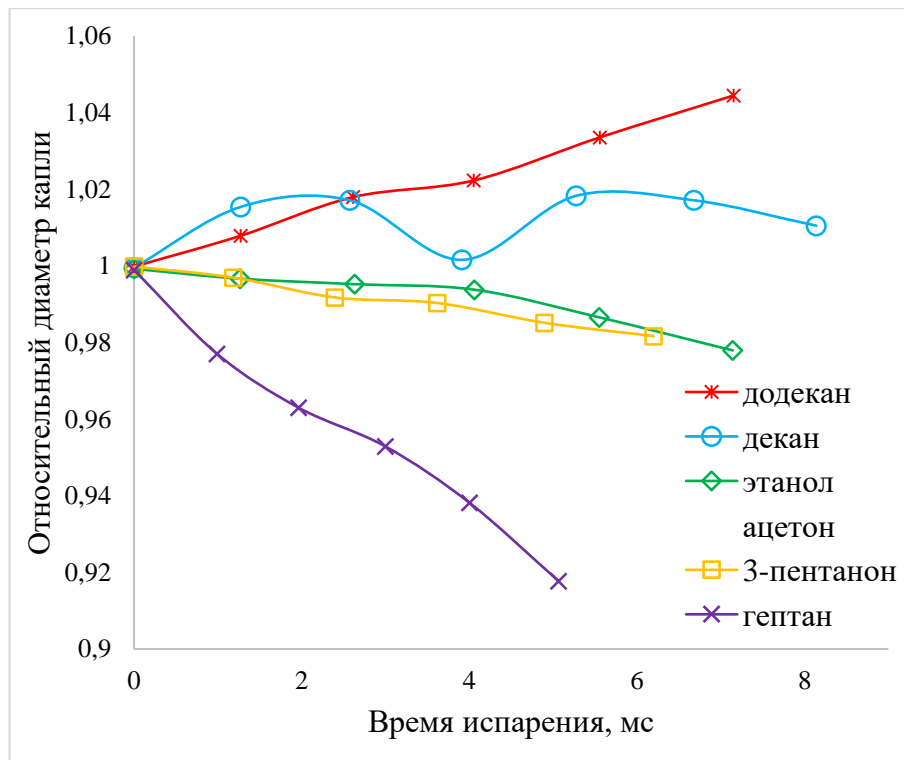


Рисунок 1.21 – Изменение диаметра капель различных видов топлива в зависимости от времени при одинаковых условиях (В. Депредюран и др. [121])

Поглощение излучения

Работы [123, 163] показывают, что поглощение термического излучения тоже влияет на время испарения и распределение температуры внутри капли. П. Лаге и К. Хакенберг [163] проведено исследование влияния степени поглощения на изменение диаметра капли смеси гептан/метанол при разных условиях (рисунок 1.22). Видно, что при степени поглощения $\alpha_R = 0,5$ время испарения сокращается в 3,5 раза относительно капли без поглощения излучения.

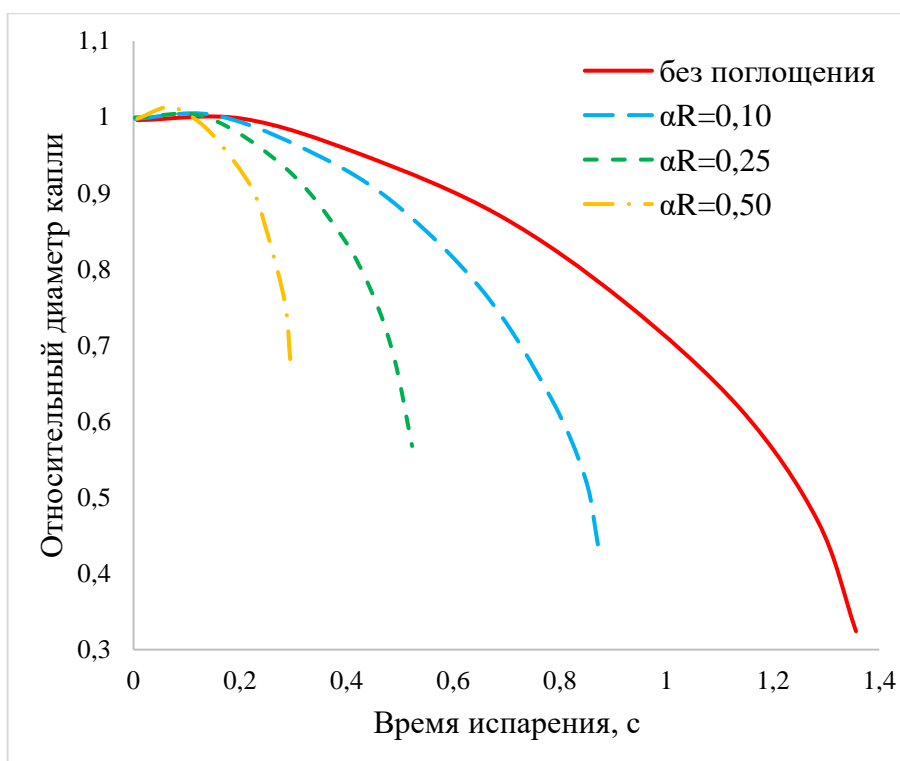
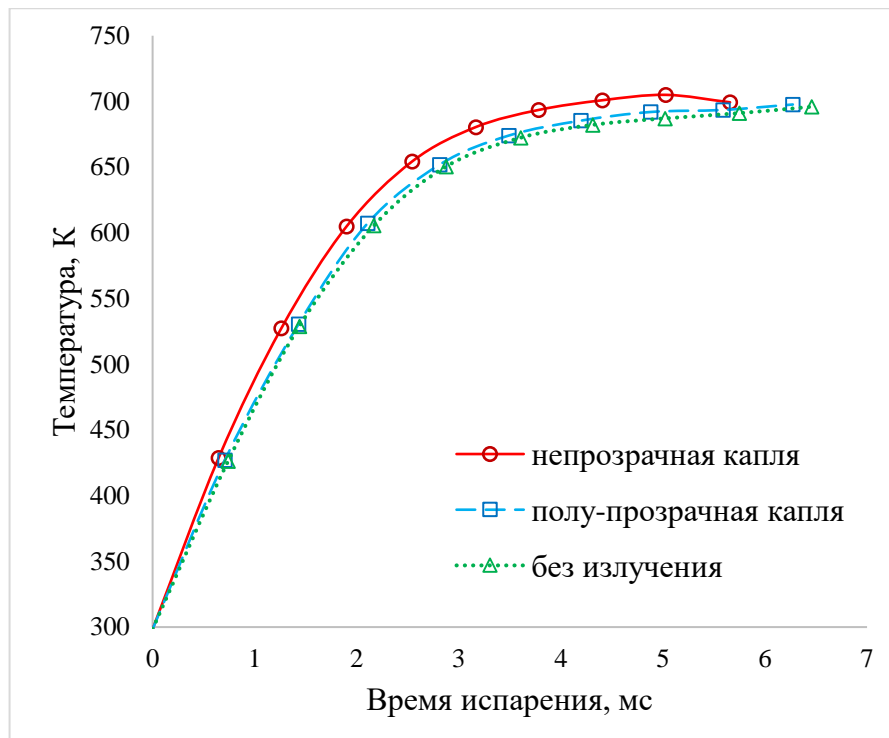
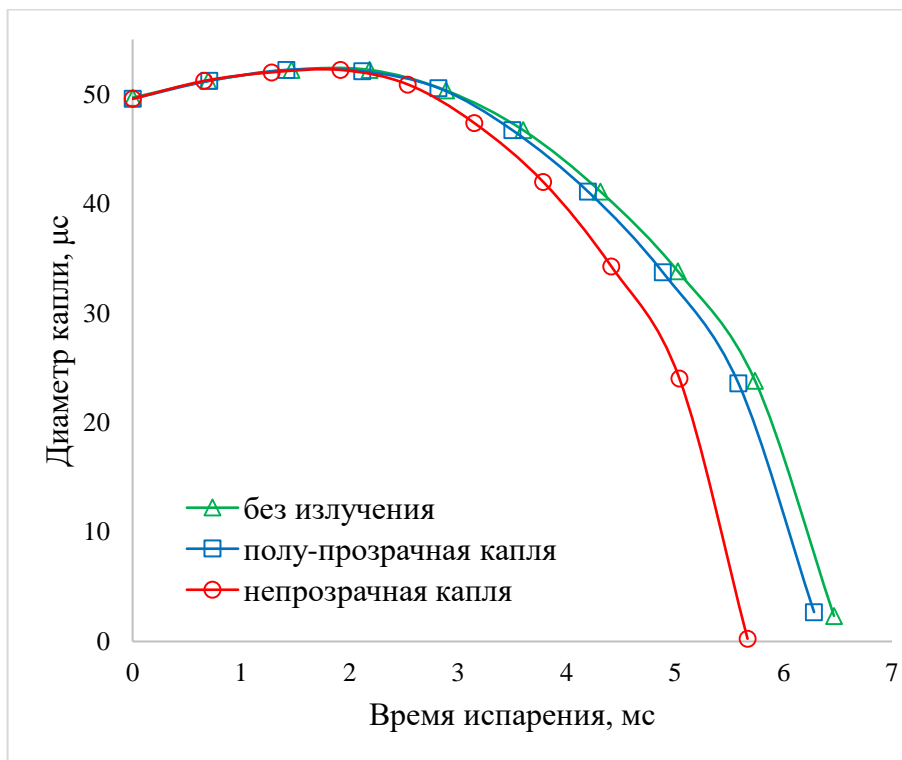


Рисунок 1.22 – Влияние поглощения излучения на изменение диаметра капли для смеси гептан-метанол (П.С. Лаге и К.М. Хакенберг [163])

В работе Л. Домбровского и др. [123] был проведён анализ влияния поглощения излучения на характеристики испарения капель дизельного топлива. Видно, что для многокомпонентных капель поглощение излучения несущественно влияет на время испарения и на распределение температуры внутри капель. Время испарения без учёта излучения выше на 1,5%, чем для полупрозрачной капли, а температура на поверхности капли отличается на 3-5% (рисунок 1.23).



а)



б)

Рисунок 1.23 – Влияние термического излучения на характеристики испарения капли дизельного топлива:

а) температура на поверхности капли; б) изменение диаметра капли

(Л.А. Домбровский и др. [123]).

Очевидно, что вышеперечисленные факторы существенно влияют на характеристики испарения капель. Особое внимание необходимо уделять составу капли и параметрам газа вокруг неё, так как в КС авиационных ГТД используются топлива различного состава, а горение происходит в широких диапазонах температур и давлений. Современные методы расчёта процессов горения должны включать модели, учитывающие эти параметры при определении характеристик испарения.

Экспериментальные данные по характеристикам испарения капель керосина и его суррогатов

Обзор литературы по исследованию характеристик испарения авиационного керосина и его суррогатов показывает, что не хватает данных в открытой литературе о зависимости температуры на поверхности капли от времени, о времени испарения и о зависимостях диаметра капли от времени. В работах [182, 185, 220] представлены экспериментальные данные изменения диаметра капли от времени для «обычного» и авиационного керосина (рисунок 1.24). Однако данные, представленные для диаметров капель, температуры, давления газа и скорости капель, не характерны для условий работы современных КС, что свидетельствует о необходимости проведения экспериментальных исследований и формировании базы данных характеристик испарения керосина и его суррогатов в условиях, характерных для современных авиационных КС. Без новых данных о характеристиках испарения капель керосина невозможна валидация новых математических моделей нагрева и испарения капель, а также невозможно определение границ применимости современных моделей.

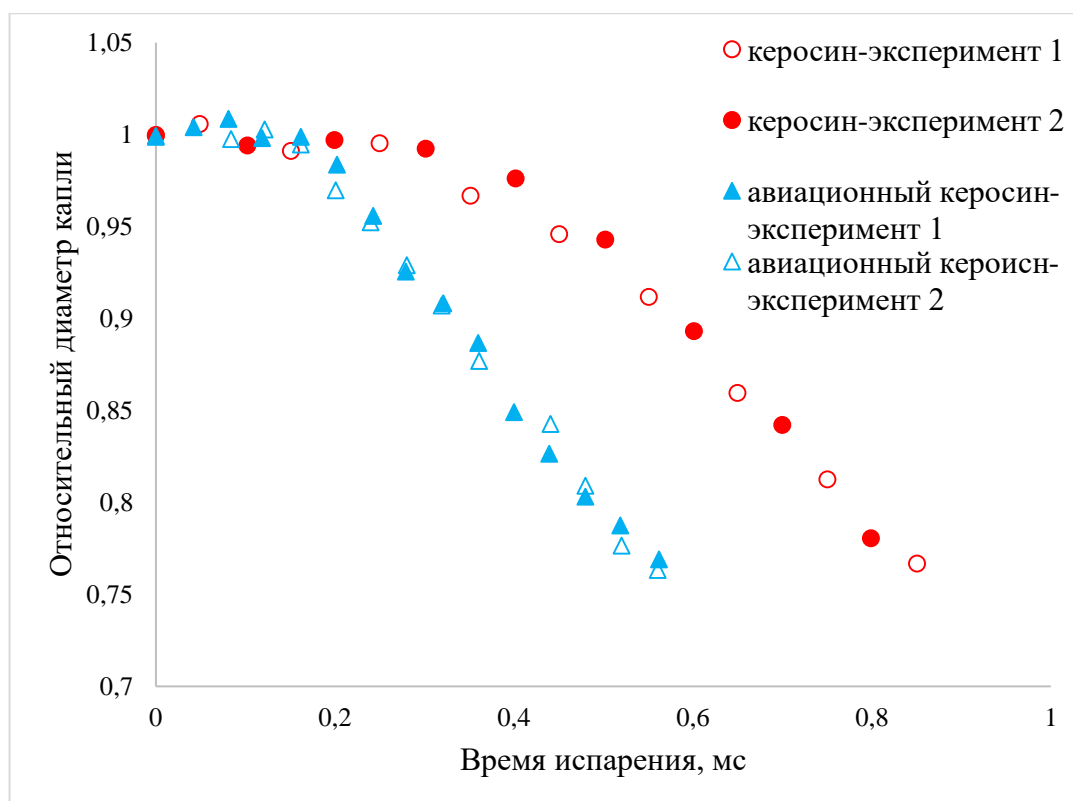


Рисунок 1.24 – Сравнение изменения диаметра капли для обычного и авиационного керосина (Фанг Ван и др. [220])

1.3 Математические модели нагрева и испарения капель жидкого топлива

Существует три основных подхода при расчёте характеристик КС ГТД: полуэмпирические модели, трёхмерное численное моделирование и кинетическое реакторное моделирование [42, 165, 50, 76, 46, 64, 63, 7, 183, 68, 38, 67]. Основным инструментом для определения характеристик КС на этапе проектирования в настоящее время является численное моделирование в трехмерной постановке [183]. С его помощью с достаточно высокой точностью определяются потери полного давления и другие газодинамические характеристики КС, а также распределение локальных значений составов ТВС и температуры. Имеющиеся математические модели, реализованные в сертифицированных коммерческих программных продуктах (например, ANSYS Fluent, ANSYS CFX и др.) также позволяют определять параметры распыла и испарения жидкого топлива, кинетические газофазные процессы окисления углеводородных топлив, включая образование вредных веществ, и другие

характеристики [50, 57, 64, 92, 183]. Однако в этом случае используются достаточно упрощенные модели как самого топлива (керосина, дизтоплива и др.), так и модели нагрева и испарения капель, кинетические механизмы окисления и образования вредных веществ [92]. Поэтому в настоящее время значительное внимание уделяется развитию методов моделирования процессов нагрева и испарения капель различных жидкостей, в том числе многокомпонентного состава [52].

Классические модели нагрева и испарения капель жидкости

Классические модели нагрева и испарения капель представляют собой модели, основанные на полуэмпирических зависимостях. Закон Срезневского – самая простая модель испарения [49, 72]. Данный закон предполагает, что величина поверхности испаряющейся капли уменьшается со временем линейно, а для каждой жидкости имеется так называемая константа испарения:

$$-\frac{ds}{dt} = \text{const} = C. \quad (1.2)$$

Максвеллом была получена простая зависимость для расчёта испарения капли, которая учитывает только процесс диффузии. Уравнение (1.3) известно как уравнение Максвелла [132]:

$$\dot{m}_d = 4\pi R^2 D_v (\rho_{v,s} - \rho_{v,\infty}), \quad (1.3)$$

где R – радиус капли, м;

D_v – коэффициент диффузии пара, м² / с;

ρ_v – плотность пара на поверхности капли, кг / м³;

$\rho_{v,\infty}$ – плотность окружающего воздуха, кг / м³.

Для низких скоростей испарения предложена модель «Diffusion Control Model» [187, 188], которая предполагает, что испарением управляет градиент диффузии пара между поверхностью капли и окружающим газом:

$$N_i = k_c (C_{i,s} - C_{i,\infty}), \quad (1.4)$$

где N_i – молярный поток пара, кмоль / (м² с);

k_c – коэффициент массообмена, м / с;

$C_{i,s}$ – концентрация пара на поверхности капли, кмоль / м³;

$C_{i,\infty}$ – концентрация пара в газовой фазе, кмоль / м³.

При этом уменьшение массы капли рассчитывается по формуле (1.5):

$$m_p(t + \Delta t) = m_p(t) - N_i A_p M_{w,i} \Delta t \quad (1.5)$$

где m_p – масса капли, кг;

A_p – площадь поверхности капли, м²;

$M_{w,i}$ – молекулярный вес i -го компонента, кг / кмоль;

Δt – временной шаг, с.

Для высоких скоростей испарения модель «Diffusioncontrolledmodel» была доработана. Получена дифференциальная модель «Convection and Diffusion Controlled Model» [172, 196], которая учитывает влияние конвективного потока (поток Стефана) между газом и паром жидкости на расстоянии от поверхности капли. Скорость испарения капли определяется выражением (1.6):

$$\frac{dm_p}{dt} = k_c A_p \rho \ln(1 + B_m), \quad (1.6)$$

где k_c – коэффициент массопереноса, м / с;

ρ – плотность газа, кг / м³;

B_m – число Сполдинга.

Модель односкоростного термолитза определяет скорость испарения капли через выражение Аррениуса [101]:

$$\frac{dm_p}{dt} = \pi d_p A e^{-\frac{E}{RT_p}}, \quad (1.7)$$

где:

d_p – диаметр капли, м;

A – пред экспоненциальный множитель, кг / (с м);

E – энергия активации, Дж / кг;

R – универсальная газовая постоянная, 8,31446 Дж / (моль К);

T_p – температура капли, К.

Последние три модели (1.5), (1.6), (1.7) реализованы в программных комплексах вычислительной газовой динамики, например, ANSYS Fluent [92]. Несмотря на то что эти модели широко используются при моделировании

процессов горения жидкого топлива в технических устройствах [107, 170, 176, 223], они не учитывают такие особенности, как многокомпонентность капли, относительную (высокую) скорость капли, насыщенность пара вокруг капель, распределение параметров (температура, массовые доли компонентов) внутри капли и другие. Опыт показывает, что такими параметрами нельзя пренебречь [43, 61, 70]. Для учёта этих параметров «классические» модели требуют серьёзные доработки. Поэтому далее рассмотрены известные по литературным источникам исследования по развитию и доработке «классических» моделей.

Современные математические модели нагрева и испарения капель.

Современные модели нагрева и испарения капель можно разделить на следующие группы (по степени сложности) [197, 198, 206]:

- 1) модели, основанные на предположении, что температура на поверхности капли равномерна и не изменяется во времени;
- 2) модели, основанные на предположении, что градиент температуры внутри капли отсутствует (бесконечная теплопроводность жидкости), но температура капли изменяется во времени;
- 3) модели, учитывающие конечную теплопроводность жидкости, но не учитывающие эффекты рециркуляции внутри капель (предельная проводимость);
- 4) модели, учитывающие как конечную теплопроводность жидкости, так и эффекты рециркуляции внутри капель за счёт введения поправочного коэффициента к теплопроводности жидкости (модели эффективной проводимости);
- 5) модели, описывающие эффекты рециркуляции внутри капель с точки зрения динамики вихря (вихревые модели);
- 6) модели, основанные на решении уравнений Навье-Стокса.

Модели из первой группы самые простые и часто использовались при аналитическом исследовании испарения и воспламенения капель в топливовоздушных смесях [105, 138, 202], но они слишком упрощённые для использования в современных методиках для CFD расчетов. Модели 5 и 6 групп в

настоящее время не планируются к внедрению в коммерческие CFD коды из-за их сложности и соответственно большой трудоемкости расчетов. Они используются для валидации разрабатываемых моделей нагрева и испарения капель, а также для более детального анализа физики процессов нагрева и испарения капель при прямом численном моделировании (Direct Numerical Simulation – DNS) [88, 108, 149, 184, 206]. Поэтому, далее обзор и анализ известных работ по моделированию процессов нагрева и испарения капель сосредоточены на моделях 2-4 групп, которые могут быть внедрены в коммерческие CFD коды.

Нагрев неиспаряющихся капель

Несмотря на то, что моделирование нагрева неиспаряющихся капель теряет свою актуальность в инженерных приложениях, эти модели служат основой для более сложных и содержательных моделей. В них допускается, что капли сохраняют сферическую форму при любой скорости движения капель, а температура по всей поверхности капли распределена равномерно, хотя и может изменяться во времени.

Для неиспаряющихся капель нагрев рассматривается в рамках двух процессов по отдельности: конвективный теплообмен и теплообмен излучением. Модели для конвективного теплообмена включают следующие модели:

- связанное аналитическое решение (жидкая фаза + газовая фаза) для неподвижных капель;
- отдельные решения для газовой и для жидкой фаз;
- нагрев движущихся капель (стационарная и нестационарная постановка).

Модели для теплообмена излучением включают следующие модели:

- теория Мие;
- анализ интегрального поглощения излучения в каплях;
- анализ геометрической оптики.

Конвективный нагрев неиспаряющихся капель

Самая распространённая модель нагрева капель (как испаряющихся, так и неиспаряющихся) основывается на том, что теплопроводность жидкости бесконечна. Эта модель не учитывает градиент температуры внутри капель, а изменение температуры во времени выводится из уравнения баланса энергии: все тепло, передаваемое от окружающего газа, расходуется на увеличение температуры капли.

В случае неподвижных сферических капель эффекты градиента температуры внутри капли учитываются с помощью решения одномерного уравнения теплообмена с учётом того, что нагрев симметричен по радиусу. Рассматриваются два граничных условия на поверхности капли: коэффициент конвективного теплообмена постоянный как минимум на протяжении маленького временного шага; тепловой поток, приближающийся к поверхности капли, равен тепловому потоку, входящему в каплю. Тепловой поток определяется с помощью решения одномерного уравнения теплообмена, но для газовой фазы [178, 197].

Полученное для неподвижных капель решение было расширено для случая движущихся капель, через модель эффективной теплопроводности (Effective Thermal Conductivity – ETC) [197]. Влияние движения капли на процессы теплообмена внутри капли учитывается путем замены теплопроводности жидкости k_l на эффективную теплопроводность k_{eff} . Эти два теплопроводности связаны соотношением [88, 214]:

$$k_{eff} = \chi_T k_l, \quad (1.8)$$

где χ_T является функцией от числа Пеклета, которое зависит от свойств жидкости и скорости жидкости вблизи поверхности капли.

Модель ETC способна с большой точностью определять среднюю температуру на поверхности капли, но не способна определять распределение температуры из-за движения внутри капли. В случае, когда теплопроводность жидкости бесконечно большая, влиянием градиента температуры внутри капель и

эффекта рециркуляции можно пренебречь. Эта модель известна как модель бесконечной теплопроводности (Infinite Thermal Conductivity – ITC) [200].

Из анализа одномерного уравнения теплообмена следует, что зависимость температуры от расстояния до центра капли R имеет параболическую тенденцию, и тогда характерны две температуры: температура в центре капли и температура на её поверхности. Данная модель носит название «Параболическая модель» [200].

Тепло, которое подводит газ каплям, характеризуется коэффициентом конвективного теплообмена h , который в случае неподвижных капель равен

$$h_0 = \frac{k_g}{R_d}, \quad (1.9)$$

где k_g – теплопроводность газа.

Во многих практических задачах целесообразно описать конвективный нагрев капель безразмерным числом Нуссельта:

$$Nu = 2h \frac{R_d}{k_g}. \quad (1.10)$$

Для неподвижных капель $Nu_0 = 2$ [200], а для движущихся капель он определяется по формуле (1.11):

$$Nu_0 = 2 + \beta_c Re^{1/2} Pr^{1/3}, \quad (1.11)$$

где Re – число Рейнольдса;

β_c – константа, определяющая по [200];

Pr – Число Прандтля.

В (1.11) число Re и число Pr определяются с учётом свойств газа и относительной скорости капель [197].

Нагрев излучением неиспаряющихся капель

Самая простая модель нагрева излучением основана на допущении, что капли – серые непрозрачные сферы, характеризующиеся излучательной способностью (ϵ). В этом случае влияние нагрева излучением можно рассматривать как чисто поверхностное явление, и потоки тепла излучением добавляются к потокам конвективного тепла, попадающим на поверхности капли.

Недостаток данной модели заключается в том, что большинство топлив прозрачны. Поэтому необходимо рассматривать капли как полупрозрачные сферы. И тогда нагрев излучением происходит не на поверхности капель (как в случае конвективного теплообмена), а за счёт поглощения проникающего внутрь капли теплового излучения [87, 135, 216].

Определение поглощения внешнего теплового излучения внутрь капель основано на теории Мие [102, 217]. Однако практическое применение этой теории ограничено в связи с высокой сложностью и трудоёмкостью вычислительных операций. В большинстве практических задач важнее интегральное поглощение теплового излучения по всему объёму капель, чем его распределение внутри капель. Данное интегральное поглощение характеризуется коэффициентом эффективного поглощения Q_a , который определяется как отношение мощности излучения, поглощаемой каплей, к мощности исходного теплового излучения. Осреднённое значение Q_a определяется по формуле:

$$Q_a = aR_d^b, \quad (1.12)$$

где a, b – это полиномы температуры с излучением θ_R из [198];

R_d – радиус капли, $\mu\text{м}$.

Следует отметить, что все вышеупомянутые модели основаны на предположении о линейности уравнения теплопроводности. Эти модели широко используются в программах CFD [103, 133, 192, 232].

Развитие моделей нагрева неиспаряющихся капель

Модель аппроксимации степенного закона (Power Law Approximation Model) позволяет аппроксимировать температурное поле внутри капли с помощью формулы (1.13) [104, 209]:

$$T(R) = c_{p0} + c_{pp} \left(\frac{R}{R_d} \right)^p, \quad (1.13)$$

где c_{p0}, c_{pp} – константы, зависящие от теплового потока на поверхности капли и от средней температуры капли;

p – константа модели.

Данная модель может описывать нестационарный нагрев сферических капель, если ввести функцию зависимости параметра модели p от времени. Модель используется при моделировании нагрева неиспаряющихся капель в газе с постоянной температурой как при маленьких, так и при больших временных шагах.

Интегральный метод теплового баланса [208, 209] вводит понятие теплового слоя, имеющего толщину $\delta(t)$, которая зависит от времени. Внутри данного слоя температура аппроксимируется с помощью параболической модели, а температура вне слоя равна начальной температуре остается постоянной (T_0):

$$T(t) \begin{cases} c_{h0} + c_{h2} \left(\frac{R-(R_d-\delta)}{R_d} \right)^2, & R_d-\delta < R \leq R_d \\ T_0, & 0 \leq R \leq R_d-\delta \leq R \end{cases} \quad (1.14)$$

Данный метод прогнозирует зависимость температуры поверхности неиспаряющейся капли от времени с большей точностью, чем параболическая модель. Однако интегральный метод теплового баланса, вместе с моделью аппроксимации степенного закона, основан на решении уравнения теплообмена при постоянном внешнем тепловом потоке, что ограничивает область их применения.

Нагрев и испарение однокомпонентных капель

Нагрев однокомпонентных капель описывается аналитическим решением уравнения теплообмена внутри капель [197, 198]:

$$T(R, T) = \frac{R_d}{R} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ q_n e^{-\kappa_R \lambda_n^2 t} - \frac{\sin \lambda_n}{\|v_n\|^2 \lambda_n^2} \mu_0(0) e^{-\kappa_R \lambda_n^2 t} - \frac{\sin \lambda_n}{\|v_n\|^2 \lambda_n^2} \int_0^t \frac{d\mu_0(\tau)}{d\tau} e^{-\kappa_R \lambda_n^2 (t-\tau)} d\tau \right\} \sin \left[\lambda_n \frac{R}{R_d} \right] + T_{eff}(t), \quad (1.15)$$

где $\lambda_n, \|v_n\|^2, q_n, \kappa_R, \mu_0(\tau)$ – параметры, определяемые уравнениями из [200].

$$T_{eff} = T_g + \frac{\rho_l L \dot{R}_d}{h}, \quad (1.16)$$

\dot{R}_d – скорость испарения капли по времени (в начале расчёта он равен 0, для i -го временного шага берётся значение \dot{R}_d i -ого временного шага).

В случае неподвижных капель, влияние испарения на число Нуссельта (которое связано с коэффициентом конвективного теплообмена h в (1.16)), описывается с помощью модели Стефана-Фукса:

$$Nu = Nu_0 \frac{\ln(1+B_T)}{B_T} . \quad (1.17)$$

Число теплообмена Сполдинга B_T определяется по формуле:

$$B_T = \frac{c_{pv}(T_g - T_s)}{L(T_s) - (|q_d|/\dot{m}_d)} , \quad (1.18)$$

где c_{pv} – удельная теплоемкость пара топлива при постоянном давлении, Дж / К;

T_g – температура газа, К;

T_s – температура на поверхности капли, К;

$L(T_s)$ – удельная теплота испарения при температуре T_s , Дж / кг;

$|q_d|$ – тепло, затраченное на увеличение внутренней энергии капли, Дж.

Скорость испарения капель для неподвижных капель равна:

$$\dot{m}_d = -4\pi R_d D_v \rho_{total} \ln(1 + B_M) , \quad (1.19)$$

где ρ_{total} – плотность смеси пара топлива и воздуха, кг / м³.

Следует отметить, что уравнение (1.19) было получено с учетом вклада молекулярной диффузии пара относительно воздуха и объёмного движения пара с воздухом (течение Стефана). Кроме того, предполагается, что ρ_{total} не зависит от расстояния до поверхности капли и определяется плотностью окружающего газа, что применимо для слабоиспаряющихся капель (при маленьких температурах поверхности капли).

Чтобы учитывать влияние плотности на поверхности капли на ρ_{total} , Тонини и Коссали [215] ввели коэффициент конвективного массообмена (по аналогии с коэффициентом конвективного теплообмена):

$$\dot{m}_d = -2\pi R_d D_v \rho_{total} Sh B_M . \quad (1.20)$$

В случае движущихся капель введены две толщины плёнки δ_T и δ_M [88], формулы которых получены при условии, что перенос молекул за счёт теплопроводности или диффузии через плёнки должен равняться интенсивности

конвективного теплообмена между поверхностью капли и внешним потоком. Эти условия представлены в виде:

$$\frac{2}{1 - \frac{R_d}{R_d + \delta_{T0}}} = Nu_0, \quad \frac{2}{1 - \frac{R_d}{R_d + \delta_{M0}}} = Sh_0; \quad (1.21)$$

тогда:

$$\delta_{T0} = \frac{2R_d}{Nu_0 - 2}, \quad \delta_{M0} = \frac{2R_d}{Sh_0 - 2}, \quad (1.22)$$

где δ_T – толщина термического пограничного слоя;

δ_M – толщина пограничного слоя массовой диффузии.

В этих моделях приняты следующие допущения:

- пары топлива вблизи поверхности капли всегда насыщены (скорость испарения капель равна скорости диффузии пара от поверхности капли в газовую фазу);
- радиус капли не меняется на протяжении временного шага, но меняется от шага к шагу из-за теплового расширения и испарения;

Очевидный недостаток данных моделей заключается в том, что не учитывается вклад каждого компонента в испарение капли, что необходимо учитывать для топлив сложного состава, таких как керосин.

Развитие моделей нагрева однокомпонентных капель.

Тепловой поток, подводимый к капле, чтобы повышать (или снижать) её температуру, определяется по формуле

$$q_d = 4\pi R_d k_l \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ q_n e^{-\kappa_R \lambda_n t} - \frac{\sin \lambda_n}{\|v_n\|^2 \lambda_n^2} \mu_0(0) e^{-\kappa_R \lambda_n^2 t} - \frac{\sin \lambda_n}{\|v_n\|^2 \lambda_n^2} \int_0^t \frac{d\mu_0(\tau)}{d\tau} e^{-\kappa_R \lambda_n^2 (t-\tau)} d\tau \right\} [-1 - h_0] \sin \lambda_n, \quad (1.23)$$

в которой предполагается, что теплопроводность жидкости конечна, что допустимо для большинства жидкостей. Тогда скорость испарения, полученная с помощью теплового потока из (1.23) определяется по формуле:

$$\dot{m}_d = -\frac{4\pi k_g R_d}{c_{pv}} \ln \left(1 + \frac{c_{pv}(T_g - T_s) \dot{m}_d}{L(T_s) \dot{m}_d - q_d} \right). \quad (1.24)$$

Нагрев и испарение многокомпонентных капель

Модели, рассмотренные выше в разделе «Нагрев и испарение однокомпонентных капель» применяются и для многокомпонентных капель. В многокомпонентных каплях разные компоненты испаряются при разных скоростях, создавая градиенты концентрации в жидкой фазе [197, 198]. Это приводит к массовой диффузии жидкой фазы, которая описывается уравнением диффузии массовой доли каждого компонента. Данное уравнение выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial Y_{l,i}}{\partial t} = D_l \left(\frac{\partial^2 Y_{l,i}}{\partial^2 R} + \frac{2}{R} \frac{\partial Y_{l,i}}{\partial R} \right), \quad (1.25)$$

где:

$Y_{l,i}$ – массовая доля i -ого компонента в жидкой фазе;

R – расстояние от центра капли;

D_l – коэффициент диффузии компонентов в жидкой фазе.

В уравнении (1.25) принимаются следующие допущения: учитывается только радиальная диффузия; коэффициент диффузии для всех компонентов одинаковый, и определяется с учётом ламинарного течения внутри капель.

Если допускать, что все коэффициенты диффузии для всех компонентов в газовой фазе равны, то скорость испарения описывается уравнением

$$\dot{m}_i = -4\pi\varepsilon_i R_d D_v \rho_{\text{сум}} \ln(1 + B_M), \quad (1.26)$$

где

$$\varepsilon_i = \frac{Y_{vis}}{\sum_i Y_{vis}}, \quad (1.27)$$

Y_{vis} – массовая доля i -го компонента в газовой фазе на поверхности капли;

R_d – радиус капли;

D_v – коэффициент диффузии компонентов в газовой фазе.

B_M – число массы Сполдинга.

Массообмен компонентов изнутри капли на её поверхность описывается уравнением диффузии массового расхода:

$$\dot{m}_{i(\text{массообмен})} = -4\pi R_d^2 D_l \left. \frac{\partial Y_{l,i}}{\partial t} \right|_{R=R_d}. \quad (1.28)$$

Массовые доли компонентов в случае неподвижных капель определяются с помощью уравнения:

$$Y_{li} = \varepsilon_i + \frac{1}{R} \left\{ \exp \left[D_l \left(\frac{\lambda_0}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{Yi0} - Q_{Y0} \varepsilon_i] \sinh \left(\lambda_0 \frac{R}{R_d} \right) + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\exp \left[-D_l \left(\frac{\lambda_n}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{Yi0} - Q_{Y0} \varepsilon_i] \sin \left(\lambda_n \frac{R}{R_d} \right) \right] \right\} . \quad (1.29)$$

В случае движущихся капель, вместо D_l используется эффективная диффузия $D_{eff} = \chi_Y D_l$,

где

$$\chi_Y = 1,86 + 0,86 \tanh [2,225 \log_{10} (Re_{d(l)} Sc_l / 30)] . \quad (1.30)$$

Данная модель носит название «модель эффективной диффузии» (Effective Diffusivity Model – EDM) [200]. Если предполагается, что диффузия компонентов бесконечно быстра, то модель называется «модель бесконечной диффузии» (Infinite Diffusivity Model – IDM) [200].

Модель, основанная на уравнении (1.25), носит название модель дискретных компонентов (Discrete Component Model – DCM) и применяется при небольшом количестве компонентов в капле [147, 195, 201]. Следует отметить, что данная модель была широко использована для исследования процессов нагрева и испарения бинарных капель [131, 211], капель дизельного топлива [90, 199] и капель керосина [100, 156, 220, 224], а также при исследовании процессов горения в двигателях разного назначения [3, 78, 164, 168, 180, 186, 205, 210].

В случае, когда количество компонентов велико, используется так называемая модель квазидискретных компонентов (quasi-discrete component model – QDCM) [130, 194], в которой используются квазикомпоненты – компоненты с дробным количеством молекул углерода и водорода:

$$\bar{n}_j = \frac{\int_{n_{j-1}}^{n_j} n f_m(n) dn}{\int_{n_{j-1}}^{n_j} f_m(n) dn} , \quad (1.31)$$

где f_m – функция распределения.

Соответствующие молярные и массовые доли квазидискретных компонентов определяются по формулам:

$$X_j = \int_{n_{j-1}}^{n_j} f_m(n) dn, \quad (1.32)$$

$$Y_j = \frac{M(\bar{n}_j)X_j}{\sum_{j=1}^{j=N_f} [M(\bar{n}_j)X_j]}. \quad (1.33)$$

Основным недостатком данной модели является допущение о том, что капля топлива состоит только из алканов. Это допущение не соответствует составу реальных топлив, например составу керосина [например: 10, 122, 160].

Для того, чтобы учитывать компоненты из разных химических групп (не только алканы), используется многомерная модель квазидискретных компонентов (Multi-dimensional quasi-discrete component model – MDQDCM) [193], для которой были введены компоненты:

$$\begin{aligned} \bar{n}_{1m} &= \frac{\sum_{n=n_{1m}}^{n=n_{(\varphi_m+1)m}} (nX_{nm})}{\sum_{n=n_{1m}}^{n=n_{(\varphi_m+1)m}} X_{nm}} \\ \bar{n}_{2m} &= \frac{\sum_{n=n_{(\varphi_m+2)m}}^{n=n_{(2\varphi_m+2)m}} (nX_{nm})}{\sum_{n=n_{(\varphi_m+2)m}}^{n=n_{(2\varphi_m+2)m}} X_{nm}} \\ \bar{n}_{3m} &= \frac{\sum_{n=n_{(2\varphi_m+3)m}}^{n=n_{(3\varphi_m+3)m}} (nX_{nm})}{\sum_{n=n_{(2\varphi_m+3)m}}^{n=n_{(3\varphi_m+3)m}} X_{nm}} \\ \bar{n}_{lm} &= \frac{\sum_{n=n_{((l-1)\varphi_m+l)m}}^{n=n_{km}} (nX_{nm})}{\sum_{n=n_{((l-1)\varphi_m+l)m}}^{n=n_{km}} X_{nm}}. \end{aligned} \quad (1.34)$$

Модель квазидискретных компонентов и многомерная модель квазидискретных компонентов также были использованы для исследования процессов нагрева и испарения капель различных видов топлива [193, 194], но попытки их внедрения в коды CFD в настоящее время не известны.

Несмотря на то, что известно много работ по созданию современных моделей нагрева и испарения капель для инженерных приложений [70, 99, 114, 118, 197, 198], существует ряд проблем, которые необходимо решать для повышения прогностической способности разработанных моделей:

- нет моделей, разработанных для капель произвольной формы;
- ограничения модели эффективной теплопроводности и модели эффективной диффузии еще не определены;
- влияние взаимодействия между каплями на характеристики испарения;
- влияние подвижной границы между каплями и окружающим газом из-за испарения;
- комплексные многокомпонентные капли;
- нагрев и испарение капель при условиях, близких к критическому состоянию;
- практическое применение продвинутых кинетических и динамических молекулярных моделей.

1.4 Моделирование авиационных топлив суррогатами керосина

При численном моделировании процессов горения в технических устройствах, которые работают преимущественно на многокомпонентном топливе, важную роль для получения достоверных результатов играет модель топлива и кинетический механизм горения данного топлива [57, 64, 165, 183]. Например, современные авиационные КС работают преимущественно на керосине, который представляет собой сложную смесь углеводородов, количество которых может составлять до нескольких сотен, и даже тысяч. Моделирование горения топлива такого сложного состава в настоящее время весьма трудоёмкий процесс, который требует мощных вычислительных ресурсов, а время расчёта составляет от несколько недель до несколько месяцев. Для устранения данной проблемы используются суррогаты керосина, то есть модельные топлива с ограниченным количеством углеводородов, которые должны с высокой точностью имитировать физико-химические свойства исходного (целевого) топлива [160]. За последние десятилетия было опубликовано большое количество работ по формированию суррогатов авиационного керосина [2, 110, 122, 157 160, 219, 221] для решения различных задач. Прежде чем создать суррогат любого

топлива, необходимо определять его исходные (целевые) физико-химические свойства.

Характеристики авиационного керосина марки ТС-1

Характеристики топлива играют важную роль в протекании рабочего процесса в установках с горением, таких как газотурбинные двигатели и установки, промышленные печи, поршневые ДВС и др. В авиационных газотурбинных двигателях используются керосины различных марок в зависимости от стандартов, установленных в странах производителях данного топлива. В Российской Федерации для дозвуковой авиации производится пять марок топлива (ТС-1, Т-1, Т-1С, Т-2 и РТ), для сверхзвуковой – две (Т-6 и Т-8В) [10]. Наиболее распространённой маркой авиационного керосина является керосин марки ТС-1, который применяется как в гражданской, так и в военной технике. В камерах сгорания авиационных ГТД протекают одновременно несколько процессов, на которые оказывают влияние свойства топлива, а именно: процесс первичного распыла, то есть процесс при котором плёнка жидкости разрушается, образуя при этом капли разных диаметров; процесс нагрева и испарения капель; процесс образования топливовоздушной смеси (ТВС); процесс горения испарённого топлива [38, 53, 67, 68]. В настоящей работе свойства авиационного керосина будут условно разделены на три аналогичные группы: распыл, нагрев и испарение, горение. Несмотря на то, что существуют стандарты, определяющие характеристики авиационных топлив, в них не регламентируются отдельные свойства топлив, которые имеют существенное влияние на рабочий процесс в КС. С другой стороны, определённые стандартами свойства могут иметь некоторый разброс в значениях в зависимости от места производства, условий хранения и других факторов. В таблице 1.2 представлен перечень физико-химических свойств керосина ТС-1 и его аналога JetA, а также референтные значения, взятые из разных источников. Следует отметить, что свойства, представленные в данной таблице, являются исходными данными для формирования суррогатов в данной работе.

Таблица 1.2 Характеристики керосина ТС-1 и его аналога JetA

№	Свойство топлива	Процессы в КС	Референтные значения	
			Jet A	ТС-1
1	2	3	4	5
1.	Число углерода	Распыл, нагрев и испарение, горение	6...16 [112]	
2.	Объёмная доля ароматиков, %	Распыл, нагрев и испарение, горение	<25 [73] 17 [110]	17,7 (прилож. А) не более 20 [10]
3.	Отношение Н/С	Горение	1,95 [157] 1,961 [221] 1.,957 [160]	1,958-1,972 [45]
4.	Молярная масса, кг/кмоль	Нагрев и испарение, горение	142 [157] 160,8 [221] 142 [160]	
5.	Цетановое число (DCN)	Горение	47,1 [157] 50 [221] 47 [110]	
6.	Пороговый индекс сажеобразования (Thresholdsootindex – TSI)	Горение	25,5 [221]	не менее 25 [10] 26
7.	Плотность, г/см ³	Распыл	0,775-0,840 [73] 0,78 [157] 0,803 [221] 0,802 [110] 0,8057 [219] 0,7969 [122]	0,792 [2] 0,775 [10] 0,780 [141] 0,785 * при 20 ⁰ С 0,762 * при 50 ⁰ С 0,778 [45]
8.	Кинематическая вязкость (мм ² /с или сСт), max	Распыл	< 8 при 20 °С [73] 4,7 при -20 С [221] 4,5 [110]	>1,25 при 20 С [10] <8 при – 40 С [10] 1,272 при 20 С 2,676 при – 20 С 1,48 при 20 ⁰ С * 1,03 при 50 ⁰ С * 1,548 при 20С **
9.	Давление насыщенных паров, кПа	Нагрев и испарение		2 ** 0,9199 [45] при 20 ⁰ С 21,4392 [160] при 100 ⁰ С

№	Свойство топлива	Процессы в КС	Референтные значения	
			Jet A	ТС-1
1	2	3	4	5
10.	Низшая теплота сгорания, МДж/кг	Горение	44,3 [157] 42,8 [73] 43,23 [160] 43,11 [219]	> 42,9 [10] 43,336
11.	Содержание Н, по массе %	Горение	13,85 [110]	14-14,1 [45]
12.	Стехиометрический коэффициент, L ₀	Горение		14,73 [45]
13.	Высота некоптящего пламени, мм	Горение		>25 [60]
14.	Критическая плотность, кг/м ³			254 [45]
15.	Критическое давление, кПа			2420
16.	Критическая температура, К			647
17.	Температура вспышки в закрытом тигле, °С		48 [110] 43 [219]	>28 [10] 37 48 **
18.	Температура начала кристаллизации, °С		-40 [73] - 51 [110] - 51[219] -45....-65 [14] - 54,5 [122]	-65 [2] <-60[10] -55
19.	Время задержки воспламенения (по стандарту ASTM), мс		4.32 [157]	
*-приведённые значения взяты из измерений ГИПРОВОСТОКНЕФТЬ (от 08.05.2018);				
**-приведённые значения взяты из исследований НПЗ (от 16.04.2018).				

Свойства керосина, влияющие на распыл топлива

Как жидкость авиационный керосин обладает следующими свойствами, влияющими на его распыл: плотность, кинематическая вязкость и коэффициент поверхностного натяжения. Плотность топлива зависит от его фракционного

состава. При увеличении тяжёлых фракций, ароматических углеводородов и уменьшении содержания парафиновых углеводородов, плотность топлива повышается. Вязкость – это свойство жидкости оказывать сопротивление перемещению под действием внешних сил одному слою жидкости относительно другого. Поверхностное натяжение – это сила, с которой жидкость сопротивляется деформации своей поверхности. Экспериментально доказано, что увеличение любого из данных параметров приводит к увеличению среднего диаметра капель по Заутеру [53, 165].

Свойств керосина, влияющие на нагрев и испарение распыленного топлива

Удельная теплоёмкость топлива показывает, какое количество теплоты необходимо подвести к топливу для того, чтобы нагреть его на один градус. Удельная теплоёмкость керосина зависит от температуры – она увеличивается при его нагревании. Зависимость теплоёмкости от температуры носит нелинейный характер. Кроме того, теплоёмкость керосина также зависит и от давления – при повышении давления она уменьшается, при высоких температурах влияние давления усиливается.

Теплопроводность топлива – величина, характеризующая молекулярный перенос тепла, обусловленный неравномерностью температуры жидкости.

Испаряемость керосина, как и других жидких углеводородных топлив, зависит от значения давления его насыщенных паров. Насыщенный пар – это пар, находящийся в термодинамическом равновесии с жидкостью. Давление насыщенного пара связано определённой для данного вещества зависимостью от температуры. Когда внешнее давление падает ниже давления насыщенного пара, происходит испарение (кипение) жидкости; когда оно выше – напротив, конденсация.

Свойства керосина, влияющие на горение испаренного топлива

Молярное отношение количества водорода к углероду – характеристика, которая определяет состав продуктов сгорания, теплотворную способность (для характерных керосину углеводородов имеется сильная зависимость между Н/С и

низшей теплотворной способностью), а также адиабатическую температуру пламени, которая коррелирует со скоростью пламени.

Молярная масса во многом определяет молекулярную диффузию и имеет большое значение для неоднородных по составу смесей. Также было показано, что молярная масса коррелирует с характеристиками испарения топлива [139] и кинематической вязкостью [230].

Цетановое число (DCN) определяет время задержки воспламенения топливоздушной смеси и зависит от группового состава смеси. Соответственно, чем больше в топливе содержится парафинов, которые являются легко воспламеняемой фракцией, тем выше цетановое число топлива, т.е. время задержки воспламенения уменьшится. Для оценки склонности топлива к образованию сажи используется пороговый индекс сажеобразования (TSI), который изменяется в диапазоне от 0 до 100. TSI используется для оценки начала образования сажи как при диффузионном горении, так и при сжигании предварительно подготовленной смеси.

Важной характеристикой авиационных топлив является теплота сгорания, которая показывает количество выделившейся тепловой энергии при полном сгорании топлива. Различают высшую теплоту сгорания, которая включает теплоту конденсации водяных паров, образующихся в процессе сгорания топлива, и низшую теплоту сгорания, при определении которой теплота, выделяющаяся при конденсации водяных паров, считается потерянной и поэтому не учитывается.

На большинство из перечисленных свойств существуют стандарты их определения экспериментальными методами. Эти стандарты представлены в таблице 1.3.

Таблица 1.3 – Стандарты на определение физико-химических свойств керосина

№	Направление	Свойство	Экспериментальные методики определения
1	2	3	4
1	Базовый	Число углерода	Не определяется
2	Базовый	Объёмная доля алканов	ГОСТ 31872-2012 [19]
3	Базовый	Объёмная доля циклоалканов и нафталинов	ГОСТ 17749-72[15] ГОСТ 31872-2012[19]
4	Базовый	Объёмная доля ароматиков	ГОСТ 31872-2012[19] ГОСТ EN 12916-2012[30] ГОСТ 6994-74[29]
5	Горение	Отношение Н/С	Не определяется
6	Горение	Молярная масса, кг/кмоль	Не определяется
7	Горение	Цетановое число (полученное цетановое число, DCN)	ГОСТ EN 15195-2014 [31] ASTMD6890 [97] ГОСТ Р 58440-2019 [36] ASTM D 4737 [74] ГОСТ 32508-2013 [22]
8	Горение	Индекс сажеобразования (TSI)	ГОСТ 4338-91 [27]
9	Распыл	Плотность, г/см ³	ASTM D4052 [77] ГОСТ 3900 [25]
10	Распыл	Кинематическая вязкость (мм ² /с или сСт), max	ГОСТ Р 53708-2009 [34] ГОСТ 33-2000 [24]
11	Нагрев и испарение	Диапазон дистилляции, °С	ГОСТ ISO 3405-2013 [32] ГОСТ 2177-99 [17]
12	Нагрев и испарение	Давление насыщенных паров, кПа	ГОСТ 1756-2000 [14] ГОСТ 31874-2012 [20] ASTMD 4953-15 [95] ASTMD323 [96] ГОСТ 33157-2014 [23] ГОСТ 1756– 2002 [13] ГОСТ 28781-90 [18]
17	Нагрев и испарение	Критическая плотность, кг/м ³	Не определяется
18	Нагрев и испарение	Критическое давление, кПа	Не определяется

№	Направление	Свойство	Экспериментальные методики определения
1	2	3	4
19	Нагрев и испарение	Критическая температура, К	Не определяется
13	Горение	Теплота сгорания, МДж/кг	ГОСТ 21261-91 [16] ГОСТ 11065 [11]
14	Горение	Содержание Н, по массе %	ГОСТ 21261-91 [16]
15	Горение	Стехиометрический коэффициент, L_0	Не определяется
16	Горение	Высота некоптящего пламени, мм	ГОСТ 4338-91 [27] АСТМ Д 1322-12 [5, 60]
20	Горение	Температура вспышки в закрытом тигле, °С	ГОСТ 6356-75 ГОСТ 4333-2014 [26]
21	Горение	Температура самовоспламенения, °С	ГОСТ 4333-2014 [26] ГОСТ 13920-68 [12]
22	Горение	Температура начала кристаллизации, °С	ГОСТ 5066-91 [28] ГОСТ 32402-2013 [21]
23	Горение	Время задержки воспламенения (по стандартам АСТМ), мс	ГОСТ EN 15195-2014 [31]

Методики формирования суррогатов керосина

Необходимость разработки суррогатов авиационных топлив была очень подробно и основательно сформулирована ещё в 2001 году в работе [128], где отмечена важность формирования суррогата, имитирующего как физические, так и химические свойства реального керосина. В настоящее время существуют два подхода к формированию суррогатов керосина: по его свойствам (суррогаты делятся на физические и химические) и по функциональным группам.

Известно много работ по созданию физических и химических суррогатов [34, 56, 89, 111, 113, 115, 116, 117, 124, 125, 127, 137, 143, 151, 152, 153, 207], в то время как работ по формированию суррогатов по функциональным группам намного меньше [120, 167, 212, 222, 230]. Во всех этих работах суррогаты были

сформированы в основном с учётом определённых базовых свойств, таких как плотность или вязкость, а также с учётом так называемых целевых характеристик горения (Combustion Property Target, CPT), то есть с учётом свойств, влияющих на горение заранее испаренной смеси. Целевые характеристики горения включают отношение H/C, молекулярный вес MW, получаемое цетановое число DCN и пороговый индекс сажеобразования TSI.

Несмотря на то что данная методология часто используется при формировании суррогатов керосина для моделирования задач горения (воспламенение, деформация пламени, время задержки воспламенения, эмиссия веществ), она не позволяет изучать другие процессы, такие как распыл, нагрев и испарение. Всего несколько работ [34, 124, 125] посвящено формированию «универсальных» суррогатов, которые учитывают большинство свойств из таблицы 1.2. Для изучения процессов распыла, нагрева и испарения жидкого топлива необходимо разработать новую методику по формированию суррогатов, которая бы учитывала такие свойства, как вязкость, поверхностное натяжение, теплоёмкость, теплопроводность, давление насыщенных паров и кривая дистилляции. Кроме того, одним из основных требований к суррогату стоит отнести возможность их расчётного и экспериментального использования, а именно наличие механизмов химической кинетики для описания процессов горения отдельных компонентов, наличие экспериментальных исследований по горению отдельных компонентов, а также доступность этих компонентов для проведения экспериментальных исследований в модельных условиях. Данные требования существенно ограничивают компоненты, которые могут быть использованы для создания суррогата и приводят к большому объёму работ, связанных с исследованием свойств отдельных углеводородов, особенно с высоким содержанием углерода, которые имеют важное значение при создании физических суррогатов, моделирующих характеристики нагрева и испарения.

Обзор разработанных суррогатов авиационного керосина

В таблице 1.4 представлены разработанные различными авторами суррогаты авиационного керосина и их характеристики. Как видно из таблицы 1.4, среди существующих суррогатов есть однокомпонентные [115], двухкомпонентные [167, 111, 157, 167] и многокомпонентные [56, 111, 120, 152, 153, 207, 212, 222, 230]. Как отмечалось в предыдущем разделе, данные суррогаты сформированы с учётом целевых характеристик горения, и только некоторые из них учитывают еще и ряд базовых свойств, таких как плотность и теплота сгорания (H_u). Для моделирования процессов горения обычно используются два кинетических механизма: PoliMi [189] и JetSurf 2.0 [86]. Стоит отметить, что только суррогаты Su1 и Su2 были проверены на модельных камерах сгорания. Из анализа данных суррогатов следует, что наиболее отработанными и доступными для использования при численном моделировании процессов горения в пакетах CFD являются суррогаты Dooley 2nd generation [125] и Su1, Su2 [56]. Тем не менее данные суррогаты не учитывают свойства, влияющие на процесс распыла (вязкость, поверхностное натяжение), а также на процессы нагрева и испарения (теплоёмкость, теплопроводность, давление насыщенных паров), что свидетельствует о необходимости разработки новых методик формирования суррогатов и соответственно новых компонентных составов суррогатов авиационного керосина.

Таблица 1.4 – Суррогаты авиационного керосина марки ТС-1 и JetA

№	Год	Название	N	CPT	CPT	CPT	CPT	ρ , кг/м ³	H_u , кДж/кг	Kin. mech	Ref.
				H/C	TSI	DCN	MW, г/моль				
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1.	1994	n-decane	1	2,2						PoliMi,Jet SurF 2.0	[115, 116]
2.	2000	Lindstedt	2							PoliMi,Jet SurF 2.0	[167]
3.	2007	Surrogate C	3	1,92 [111]						PoliMi	[153]
4.	2007	Surrogate D	3	1,92							[111]
5.	2007	Surrogate E	3	1,84							[111]
6.	2007	Modified Aachen	2	1,97 1,99 [122]	33,76 [122]		157,0 [122]	771 [122]		PoliMi	[111]
7.	2007	Drexel Surrogate 2	4	1,97						PoliMi	[111]

№	Год	Название	N	CPT	CPT	CPT	CPT	ρ , кг/м ³	H _{un} , кДж/кг	Kin. mech	Ref.
				H/C	TSI	DCN	MW, г/моль				
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
8.	2007	Dean	3							JetSurF 2.0	[120, 212]
9.	2008	Stanford A	5	2,092 [140]	9,75 [140]		140,0 [140]			PoliMi	[218]
10.	2010	Huber	8	1,87		45,6	156,86		43,10		[152]
11.	2010	Slavinskaya	5	1,727 [122]	35,86 22,94 [122]	45,33 [122]	145,0 158,5 [122]	772 [122]	45		[207]
12.	2010	Dooley 1nd generation POSF 4658	3	2,01	14	47,1	120,67	736		PoliMi	[124]
13.	2012	Dooley 2nd generation	4	1,950	20,40	48,50	138,7	755	43,55	PoliMi	[125]
14.	2014	Kim UM1	4	1,967		46,8	143,5		43,62	PoliMi	[160]
15.	2014	Kim UM2	4	1,881		46,7	148,6		43,36	PoliMi	[160]
16.	2016	Yu New1stG	3	2			123,81			PoliMi	[230]
17.	2016	Yu New2stG	4	1,97			142,9			PoliMi	[230]
18.	2017	Won Surrogate 1	3	1,961	23,80	50,00	143,2	768	43,00	PoliMi	[222]
19.	2017	Won Surrogate 2	3	1,947	25,50	50,60	156,9	777	42,90	PoliMi	[222]
20.	2017	Won Surrogate 3	4	1,951	25,50	50,00	160,8	781			[222]
21.	2017	Won Surrogate 4	9	1,936	25,30	50,00	150,7	778			[222]
22.	2019	Su1	6	1,96			147,1	778		PoliMi	[56]
23.	2019	Su2	4	1,92			141,7	782		JetSurF 2.0	[56]
24.	2019	Jameel	2	1,940		46,80	124,0	780	46,2		[157]

Заключение по первой главе

В первой главе рассмотрены работы, посвящённые исследованию влияния размеров капель, а именно среднего диаметра по Заутеру, на характеристики КС, такие как эмиссия вредных веществ (NO_x , CO , HC), полнота сгорания, неравномерность поля температур на выходе из КС, срывные характеристики и другие. Проанализированы исследования влияния различных параметров окружающей газовой среды и свойств жидкости на характеристики нагрева и испарения капель различного диаметра. Представлен обзор существующих моделей расчёта характеристик нагрева и испарения капель, отмечены преимущества и недостатки каждой из моделей. Приведён обзор разработанных суррогатов авиационного керосина и методов их формирования. На основании

исследования состояния вопроса о процессах нагрева и испарения капель в КС авиационных ГТД можно сделать следующие выводы.

1. Характеристики камеры сгорания, такие как эмиссия вредных веществ, полнота сгорания топлива, устойчивость к бедному срыву пламени и другие, во много определяются распределением топлива в зоне горения. В свою очередь, распределение топлива определяется характеристиками воздушного потока, характеристиками распыла топлива, а также скоростью нагрева и испарения отдельных капель топлива. Таким образом, необходимо учитывать все эти явления при формировании математической модели рабочего процесса камеры сгорания на этапе ее проектирования и доводки.

2. Параметры газа вокруг капли, а также её состав, существенным образом влияют на характеристики испарения. Так как КС авиационного ГТД работает на различных режимах, при которых температура и давление на входе в КС меняются в широком диапазоне, и на различных видах топлива, необходимо учитывать эти параметры при изучении и моделировании процессов горения в КС авиационных ГТД.

3. Модели нагрева и испарения капель, реализованные в современных программных продуктах для моделирования процессов в КС ГТД в трехмерной постановке, не учитывают такие важные явления, как многокомпонентность капли, распределение параметров внутри капли, насыщенность пара вокруг капель. С другой стороны, существуют теоретически работы, направленные на уточнение моделей этих явлений. Таким образом, актуальной является задача формирования модели нагрева и испарения капель многокомпонентных топлив, позволяющая учитывать различные процессы в камере сгорания.

4. Для реализации методов математического моделирования рабочего процесса КС ГТД необходимо сформировать модель авиационного топлива (керосина), так называемый суррогат керосина, который можно использовать в программах CFD. Существующие суррогаты авиационного керосина разработаны с учётом ограниченного количества физико-химических свойств, что не позволяет использовать их при исследовании других важных процессов, таких как распыл,

нагрев и испарение. Новые методики формирования суррогатов необходимо разработать для учёта таких свойств, как вязкость, поверхностное натяжение, теплоёмкость, теплопроводность и давление насыщенных паров.

5. В известной литературе не представлено достаточное количество данных по характеристикам испарения капель керосина и его суррогатов, что затрудняет валидации новых математических моделей нагрева и испарения. Поэтому необходимо проводить дополнительные широкие экспериментальные исследования по определению характеристик нагрева и испарения капель керосина и его суррогатов в условиях, характерных для современных КС.

На основе представленного выше анализа современного состояния вопроса сформулированы следующие цель и задачи работы.

Цель работы: Повышение точности определения эмиссионных и эксплуатационных характеристик КС на этапе проектирования и доводки авиационных ГТД на основе разработанного метода моделирования процессов нагрева и испарения капель многокомпонентного жидкого топлива в трёхмерной постановке.

Задачи работы:

1. Разработка метода моделирования процессов нагрева и испарения капель в трёхмерной постановке, учитывающего многокомпонентный состав капли, концентрацию компонентов внутри капли, насыщенность пара вокруг капли и относительную скорость капли.

2. Формирование суррогатов многокомпонентных жидких топлив, отличающихся от существующих учётом таких свойств, как теплоёмкость, теплопроводность и давление насыщенных паров, влияющих на процессы нагрева и испарения, а также с учётом кривой дистилляции.

3. Экспериментальное исследование характеристик испарения капель многокомпонентных жидких топлив (керосина и его суррогатов). Валидация разработанного метода расчёта процессов нагрева и испарения капель многокомпонентного состава.

4. Определение характеристик камеры сгорания авиационного ГТД с использованием разработанного метода моделирования процессов нагрева и испарения многокомпонентных капель.

2 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ И УСТАНОВКИ

В соответствии с поставленными задачами исследования и необходимостью валидации разрабатываемых методики формирования суррогатов авиационного керосина, математической модели нагрева и испарения капель топлива, а также метода расчёта основных характеристик КС с учётом разработанной модели нагрева и испарения капель керосина были модернизированы соответствующие установки и адаптированы методики проведения и обработки результатов экспериментов. Для определения свойств жидкостей, влияющих на распыл, нагрев и испарение капель на базе Инжинирингового центра Самарского университета им. Королева было внедрено оборудование для определения физико-химических свойств жидких топлив многокомпонентного состава. Определение состава продуктов сгорания и параметров потока в модельной КС осуществлялось на высокотемпературной установке в лаборатории исследования моделей камер сгорания научно-образовательного центра газодинамических исследований (НОЦ ГДИ) Самарского университета им. Королева [40, 59, 79]. Полученные данные были использованы для валидации метода моделирования процессов горения в КС с использованием разработанных моделей нагрева и испарения капель. Исследования характеристик испарения капель керосина и его суррогатов проводилось в лаборатории тепломассопереноса Инженерной школы энергетики Томского политехнического университета [51]. Объектами исследования являлись: авиационный керосин ТС-1 и его разрабатываемые суррогаты, а также модельная камера сгорания – прототип КС малоразмерного ГТД.

2.1 Экспериментальные установки для исследования физико-химических свойств многокомпонентных топлив и их суррогатов

При разработке новой методики формирования суррогатов керосина и разработке суррогатов с заданными свойствами проводилось определение следующих параметров исследуемых жидких топлив и его компонентов: плотность, вязкость, поверхностное натяжение, теплоёмкость, теплопроводность,

давление насыщенных паров, кривая дистилляции, отношение Н/С, молекулярный вес MW, цетановое число DCN и индекс сажеобразования TSI.

Исследование характеристик, влияющих на распыл топлива

Плотность жидких топлив в данной работе измерялась по ГОСТ Р 57037-2016 «Нефтепродукты. Определение плотности, относительной плотности и плотности в градусах API цифровым плотномером» [35]. Измерение плотности производится на цифровом анализаторе, состоящем из U-образной осциллирующей трубки для образца топлива, системы электронного возбуждения, системы вычисления частоты и дисплея. Сущность метода заключается в том, что в осциллирующую трубку помещают небольшой объем испытуемой жидкости (от 1 см³ до 2 см³) и по изменению частоты колебаний, вызванных изменением массы трубки, определяется плотность жидкости.

Вязкость жидких топлив определялась по ГОСТ 33-2000 «Нефтепродукты. Прозрачные и непрозрачные жидкости. Определение кинематической вязкости и расчёт динамической вязкости» [24] производилось с помощью вискозиметра стеклянного капиллярного калиброванного. Сущность метода заключается в следующем: калиброванным стеклянным вискозиметром измеряется время истечения (в секундах) определённого объёма испытуемой жидкости под влиянием силы тяжести при постоянно контролируемой температуре. Кинематическая вязкость вычисляется произведением времени истечения на постоянную вискозиметра.

Исследование характеристик, влияющих на нагрев и испарение капель топлива

Теплоёмкость и теплопроводность топлива измерялась с помощью прибора TEMPOS (рисунок 2.1), который предназначен для измерений теплофизических параметров строительных, теплоизоляционных и прочих материалов. Принцип действия прибора основан на измерении скорости изменения температуры цилиндрического зонда, погруженного в испытываемый материал. Диапазон измерений теплопроводности (при использовании

стандартного набора зондов) 0,03–6,0 Вт/(м·К), теплоемкости: 0,5–4,0 мДж/(м³·К) при относительной погрешности измерений ± 10% [62].



Рисунок 2.1 – Прибор TEMPOS для измерения теплопроводности и теплоемкости жидкости

Кривая дистилляции и фракционный состав топлива были определены с помощью автоматического аппарата АРН-ЛАБ-11 [1], который предназначен для определения фракционного состава светлых и темных нефтепродуктов при атмосферном давлении в соответствии с ГОСТ Р ЕН ИСО 3405-2007 [37], ГОСТ ISO 3405-2013 [32], ГОСТ 2177-99 [17], ГОСТ Р 53707-2009 [33], ASTM D86-23 [98], ISO 3405:2019 [155], IP123 [154] и другими аналогичными стандартами в диапазоне температур до 450°C.



Рисунок 2.2 – Аппарат АРН-ЛАБ-11 для определения кривой дистилляции и фракционного состава многокомпонентного углеводородного топлива

Кривая дистилляции многокомпонентного топлива в аппарате АРН-ЛАБ 11 определяется следующим образом. Сначала нагревается колба для разгонки с образцом испытуемой жидкости. Длительность процесса нагрева устанавливается таким образом, чтобы временной интервал между началом нагрева и достижением температуры кипения находился в диапазоне 7–10 мин. Фиксируется температура начала кипения. Затем интенсивность нагрева регулируется таким образом, чтобы время от достижения температуры начала кипения до получения 5% (по объёму) отгона составляло 60–100 с. И наконец, на следующем этапе интенсивность нагрева устанавливают так, чтобы средняя скорость конденсации от 5% (по объёму) отгона до конца разгонки была равномерной и составляла от 4 до 5 см³/мин.

В свою очередь разгон на фракции в аппарате АРН-ЛАБ-11 происходит следующим образом. Нагревается колба для разгонки с образцом испытуемой жидкости. Интенсивность нагрева на этой стадии регулируется так, чтобы временной интервал между началом нагрева и достижением температуры начала кипения был 7–10 мин. Далее нагрев регулируется так, чтобы время от достижения температуры начала кипения до получения 5 % (по объёму) отгона составляло 60-100 с. Затем продолжают регулировать нагрев таким образом, чтобы средняя скорость конденсации от 5 % (по объёму) отгона до 20 % (по объёму) отгона была равномерной и составляла от 4 до 5 см³/мин. Выключается нагрев, меняется приемный цилиндр и повторяется процедура еще 3 раза. В завершение процедуры разгона по фракциям оставшиеся в колбе для разгонки 20% (по объёму) жидкости переливаются в приемный цилиндр.

Прибор АРН-ЛАБ-11 обеспечивает точность поддержания скорости разгонки $\pm 0,5$ мл/мин; разрешающую способность измерения температуры $\pm 0,1^{\circ}\text{C}$; разрешающую способность измерения объема конденсата $\pm 0,1$ мл.

Исследование характеристик, влияющих на горение испарённого топлива

Соотношение Н/С и молярный вес (MW) многокомпонентного углеводородного топлива (например керосина) определить экспериментальным способом возможно только при выявлении компонентного состава данной

жидкости. На сегодняшний день существующие способы определения состава жидких углеводородных топлив обладают высокой стоимостью и низкой достоверностью. Поэтому на практике используют косвенное определение Н/С и MW через корреляционные зависимости:

- для определения соотношения Н/С использовались зависимости из [40, 45];
- для определения молярного веса (MW) использовались зависимости из [40, 139].

Цетановое число топлива определялось в соответствии с ГОСТ Р 58440-2019 «Топлива среднестиллятные. Определение производного цетанового числа с использованием камеры сгорания постоянного объема с непосредственным впрыском топлива» [36]. В данном методе для определения цетанового числа используется анализатор сгорания с камерой сгорания с контролируемыми температурой и давлением. Сущность данного метода заключается в следующем: испытуемый образец пробы материала впрыскивается в камеру сгорания постоянного объема с контролируемой температурой и давлением, которая ранее была заполнена синтетическим воздухом установленного качества. Каждый впрыск начинает цикл сгорания с воспламенением от сжатия, детектируемого датчиком давления. Задержку воспламенения и задержку сгорания измеряют от момента возрастания электронного сигнала, активирующего соленоид форсунки, до двух конкретных точек волны давления в камере сгорания, образующейся в цикле сгорания. Полная последовательность испытания включает 5 предварительных циклов впрыска и 15 последующих циклов впрыска, используемых для анализа образца.

Индекс сажеобразования (TSI) определяется косвенно с помощью такого параметра, как высота некоптящего пламени. Высота некоптящего пламени определялась в соответствии с ГОСТ 4338 «Топливо для авиационных газотурбинных двигателей. Определение максимальной высоты некоптящего пламени» [27]. Максимальная высота некоптящего пламени – это высота пламени (в миллиметрах), которую оно достигает до появления дыма, при сжигании

топлива в стандартной лампе при определённых условиях. В данной работе высота некоптящего пламени измерялась с помощью аппарата ЛВП-М [4], который предназначен для испытания нефтепродуктов с целью определения максимальной высоты некоптящего пламени светлых нефтепродуктов по ТУ 4321-102-001516-96 (рисунок 2.3).



Рисунок 2.3 – Аппарат ЛВП-М для определения высоты некоптящего пламени

Определение TSI осуществляется следующим образом: высушенный после экстрагирования фитиль пропитывают образцом и вставляют в фитильную трубку резервуара. Подготовленную пробу объемом 20 см^3 аккуратно наливают в чистый и сухой резервуар лампы при комнатной температуре. Затем фитильная трубка вставляется в резервуар и закручивается. Лампу зажигают, устанавливают высоту пламени около 10 мм и дают лампе гореть 5 мин. Далее высота фитиля устанавливается таким образом, чтобы появился дым, затем высота пламени медленно понижается до полного исчезновения дыма.

2.2 Экспериментальная установка для исследования характеристик нагрева и испарения многокомпонентных капель

Эксперименты по определению характеристик испарения керосина и его суррогатов проводились на стендах лаборатории тепломассопереноса Инженерной школы энергетики Томского политехнического университета [51].

Нагрев каплей осуществлялся в муфельной трубчатой печи Nabertherm R 50/250/13, которая способна нагревать воздух в диапазоне температур от 30 °С до 3000 °С. Схема установки представлена на рисунке 2.4 [213].

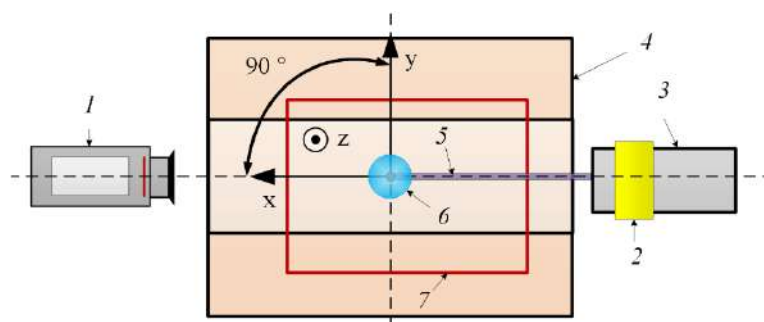


Рисунок 2.4 – Схематическое изображение экспериментальной установки для определения характеристик нагрева и испарения капель:

- 1 – высокоскоростная видеокамера; 2 – осветительный прожектор;
- 3 – моторизованное координатное устройство (МКУ);
- 4 – трубчатая муфельная печь; 5 – держатель (малоинерционная термопара);
- 6 – капля; 7 – регистрационная область

Исследуемые капли вводились в область регистрации внутри муфельной печи с помощью координатного механизма, на конце которого находился спай малоинерционной термопары типа К диаметром 0,3 мм. Для генерации капель использовался электронный дозатор Finnpipette Novus с функциями забора жидкости от 5 до 50 мкл (шаг варьирования генерируемого объема составляет 0,1 мкл). Регистрация изменений температуры разогретой области T_{gas} и воды T_{aw} во время проведения экспериментов выполнялась с использованием системы, состоящей из комплекса сбора данных National Instruments и малоинерционных термопар типа К с систематической погрешностью измерения температуры менее чем ± 3 К и систематической погрешностью измерения времени 0,1 с.

Начальная температура капли контролировалась термопарой и поддерживалась на уровне 300 ± 5 К. Давление окружающей среды атмосферное, принималось равным 101325 Па, температура газа контролировалась термопарой и поддерживалась на уровне 640 ± 10 К. Область регистрации подсвечивалась с

помощью проектора MultiLed QT (GS Vitec GmbH, Германия) для улучшения контрастности изображения капель. Параметры проектора следующие: объектив 15°; световой поток 12000 люмен (белый), мощность 150 Вт. Интенсивность света (0–100%) регулировалась контроллером MultiLed G8.

Процессы нагрева и испарения капель регистрировались с помощью высокоскоростной видеокамеры Phantom Miro M310 (Vision Research, США) со следующими характеристиками: частота 3260 кадров в секунду при разрешении 1280×800 пикселей; глубина 12 бит; минимальная экспозиция 1 мкс; размер пикселя 20 мкм; автоматический запуск по изображению. Частота съемки при проведении экспериментов составляла 1000 fps при разрешении 512×512 пикселей и времени экспозиции 1 мкс. Видеорегистрация процессов прогрева и испарения капель начиналась в момент достижения последней области регистрации. Процесс движения капли от момента ввода капли в печь до области регистрации составлял около 1,5 с со скоростью $0,2 \pm 0,05$ м/с. Вследствие этого зависимости $R_d(t)$ смещены по оси времени на 1,5 с.

Задержки по времени регистрации средней температуры капель в экспериментах не было. Первые 1,5 с капли прогревались при вынужденной конвекции со средней относительной скоростью движения капель $0,2 \pm 0,05$ м/с, далее нагрев капель осуществлялся при естественной конвекции до их полного испарения.

Полученные по результатам экспериментов видеокadres обрабатывались с использованием программного обеспечения MatLab. Видеокadres, показывающие изменение формы капель, были переведены в формат avi. Они использовались в качестве входных данных в программном обеспечении. Затем видеокadres были преобразованы в 8-битные черно-белые изображения. На следующем этапе была выполнена бинаризация изображений. Порог бинаризации подбирали индивидуально для каждой серии экспериментов по методу Оцу [136]. Согласно данному методу вычитание фона от объекта исследований (в нашем случае капли)

осуществляется через «adaptive threshold». Площадь, занимаемая держателем, вычиталась из бинарных изображений. Площадь была определена после завершения процесса набухания/испарения капель. На следующем этапе была применена специальная функция для «заполнения пробелов» в изображениях. Функция «заполнения пробелов» применялась для заполнения пустых областей, образующихся из-за световых бликов, отражающихся от поверхности несферических капель и держателя после процедуры его вычитания. На последнем этапе определялось число пикселей изображения, занятого реальной несферической и несимметричной каплей с последующим расчетом фактической площади, занимаемой этой каплей.

Эквивалентный радиус определялся как радиус окружности с площадью, равной фактической площади, занимаемой несферической и несимметричной каплей. Данный метод расчёта эквивалентного диаметра по фактической площади применим к каплям неправильной формы в отличие от двух других известных методов расчёта эквивалентных диаметров, когда с помощью эквивалентного диаметра капли вычисляется площадь поверхности эквивалентного эллипсоида или объём эквивалентного эллипсоида интегральным методом. Для оценки и проверки точности результатов измерений каждый опыт повторялся 3 раза. Систематические ошибки измерения начальных радиусов капель не превышали 0,044 мм, что соответствовало двум масштабным факторам. Случайные ошибки Δ_r оценивались как:

$$\Delta_r = t(\alpha_c, n) S, \quad (2.1)$$

где $t(\alpha_c, n)$ – коэффициент Стьюдента, зависящий от числа измерений n и доверительной вероятности α_c , принимаемый равным 0,95;

S – квадратичный корень отклонения.

Сумма погрешностей (систематическая + случайная) измерений не превышала $\pm 0,05$ мм, что составляет $\pm 5\%$ от начального размера капли. Последовательность обработки изображений показана на рисунке 2.5.

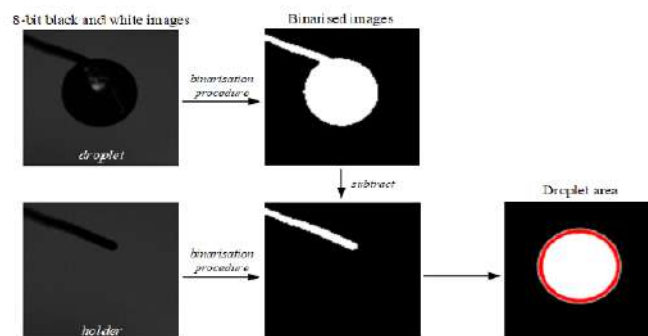


Рисунок 2.5 – Применение программы MatLab для анализа видеок кадров с изображениями капель

Заклучение по второй главе

В рамках реализации поставленных задачи по разработке методики формирования суррогатов авиационного керосина, математической модели нагрева и испарения капель топлива, а также метода расчёта основных характеристик КС с учётом разработанной модели нагрева и испарения капель керосина можно сделать следующие выводы:

- создан комплекс экспериментального оборудования, позволяющий определять физико-химические свойства жидких топлив, а именно: плотность, вязкость, теплоёмкость, теплопроводность, кривую дистилляции, Н/С, молекулярный вес, цетановое число, индекс сажеобразования. Все оборудование позволяет определять перечисленные свойства с допустимым минимальным расхождением по ГОСТу;

- описана экспериментальная установка определения характеристик испарения жидких топлив из Томского политехнического университета. Данная установка позволяет определять изменение диаметра испаряющейся капли с помощью программы Matlabc погрешностью $\pm 5\%$ от начального диаметра, а также изменение температуры в приповерхностном слое капли с погрешностью $\pm 10\text{K}$;

Таким образом, подготовлено необходимое оборудование и установки для валидации методики формирования суррогатов керосина, для валидации новых математических моделей нагрева и испарения капель, а также для исследования процессов горения разработанных суррогатов керосина в камерах сгорания ГТД.

3 ФОРМИРОВАНИЕ СУРРОГАТА АВИАЦИОННОГО КЕРОСИНА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАБОЧЕГО ПРОЦЕССА КАМЕР СГОРАНИЯ ГТД С УЧЕТОМ НАГРЕВА И ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ

Как показано в главе 1, разработанные ранее различными авторами суррогаты керосина для моделирования рабочего процесса КС авиационных ГТД были сформированы без учёта свойств, влияющих на процессы нагрева и испарения капель. Поэтому в данной главе, в соответствии с поставленными задачами исследования, разработана методика формирования суррогатов керосина [71] с учётом таких свойств многокомпонентных углеводородных топлив, как вязкость, коэффициент поверхностного натяжения, теплоёмкость, теплопроводность, давление насыщенных паров и кривая дистилляции. Кроме того, рассмотрены методы расчёта таких свойств многокомпонентных жидкостей как плотность, цетановое число, индекс сажеобразования и другие.

3.1 Выбор и обоснование методов расчёта физико-химических свойств многокомпонентных углеводородных топлив и их суррогатов

Для расчёта физико-химических свойств многокомпонентных углеводородных топлив должен быть известен состав смеси и объёмные доли компонентов смеси.

Расчёт массовой и молярной доли отдельного компонента смеси.

Массовая доля отдельных компонентов смеси определяется по формуле (3.1), а молярная доля по формуле (3.2) [45]:

$$y_i = V_i \cdot \frac{\rho_i}{\rho_{см}}, \quad (3.1)$$

где y_i – массовая доля i -го компонента;

V_i – объёмная доля i -го компонента;

ρ_i – плотность i -го компонента при нормальных атмосферных условиях, $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$;

$\rho_{см}$ – плотность смеси при нормальных атмосферных условиях, $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$.

$$\chi_i = \frac{\frac{y_i}{M_i}}{N_{см}}, \quad (3.2)$$

где χ_i – молярная доля i -го компонента;

M_i – молярная масса i -го компонента, $\frac{\text{г}}{\text{моль}}$;

$$N_{\text{см}} = \sum \frac{y_i}{M_i}. \quad (3.3)$$

Расчет свойств смеси, влияющих на распыл топлива

Из литературы известны различные методы определения физико-химических свойств углеводородных смесей и их отдельных компонентов, поэтому для обоснования выбора той или иной методики было проведено сравнение результатов расчёта с экспериментальными данными на примере индивидуальных углеводородных компонентов, входящих в состав известных суррогатов авиационного керосина. При этом часть экспериментальных данных взята из литературных источников, а часть получена в лаборатории НОЦ ГДИ Самарского университета им. Королева в рамках данной работы.

Расчёт плотности отдельных компонентов и смеси

Как известно плотность жидкости зависит от температуры [45]. Для определения плотности отдельных компонентов смеси в зависимости от температуры были рассмотрены методики расчёта из работ [122, 45, 225].

В работе [225] для широкого круга компонентов углеводородных смесей для расчёта плотности отдельного компонента предложена формула (3.4):

$$\rho_i = 1000 \cdot A \cdot B^{-\left(1 - \frac{T}{C}\right)^n}, \quad (3.4)$$

где ρ_i – плотность i -го компонента, $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$;

A, B, C, n – регрессионные коэффициенты i -го компонента;

T – заданная температура, К.

Регрессионные коэффициенты берутся из справочника [225] по химической формуле или идентификатору «CAS No» каждого компонента. «CAS No» – уникальный численный идентификатор химических соединений, внесённых в реестр Химической реферативной службы. Она присваивает этот идентификатор всем веществам, когда-либо упомянутым в литературе. Уникальный

идентификатор предназначен для более достоверного и удобного поиска, а также идентификации химических веществ за счёт устранения проблемы возможного различного наименования одного и того же химического соединения. В настоящее время практически все химические базы данных имеют поиск по регистрационному номеру CAS. Отдельные изомеры молекул также получают собственный номер CAS.

При известной величине плотности компонента смеси для фиксированной температуры, плотность этого компонента при изменении температуры в работе [122] предложено определять по формуле (3.5), а в работе [45] по формуле (3.6):

$$\frac{\rho_i}{\rho_0} = \frac{1}{1 + \beta \cdot (T - T_0)}, \quad (3.5)$$

где ρ_0 – эталонная плотность $\left(\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}\right)$ при эталонной температуре T_0 , К;

β – объемный температурный коэффициент, $\frac{1}{\text{К}}$, который определяется по формуле

$$\rho_i = \rho_{20} + \beta \cdot (t - 20), \quad (3.6)$$

где ρ_{20} – плотность топлива при 20 °С, $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$;

β – средняя температурная поправка, $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3 \cdot \text{К}}$, которая вычисляется как:

$$\beta = -(820,5 - 0,130 \cdot \rho_{20}) \cdot 10^{-3}. \quad (3.7)$$

Для расчёта плотности многокомпонентной смеси ($\rho(T)_{\text{см}}$) при известных значениях плотности и объёмной доли каждого компонента применялась формула (3.8) [166]:

$$\rho(T)_{\text{см}} = \sum V(T)_i \cdot \rho(T)_i, \quad (3.8)$$

где $\rho(T)_{\text{см}}$ – плотность смеси, $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$;

$V(T)_i$ – объёмная доля i -го компонента при заданной температуре T ;

$\rho(T)_i$ – плотность i -го компонента при заданной температуре, $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$.

Сравнение результатов расчёта плотности по трём упомянутым выше формулам (3.4), (3.5), (3.6) проводилось для химических компонентов, представленных в таблице 3.1. Данные компоненты были выбраны исходя из обзора литературы по существующим суррогатам авиационного керосина (см. главу 1). Полученные расчётные значения сравнивались со справочными данными из работы [122] по величине плотности отдельных компонентов (ρ_i) при температуре 298К.

Таблица 3.1 – Плотность компонентов при заданной температуре $T=298$ К

Химическая формула (CAS №)	Справочные данные [122]	Формула (3.4) [255]		Формула (3.5) [122]		Формула (3.6) [45]	
	ρ_i , кг/м ³	ρ_i , кг/м ³	Δ , %	ρ_i , кг/м ³	Δ , %	ρ_i , кг/м ³	Δ , %
1	2	3	4	5	6	7	8
C ₁₀ H ₂₂ (124-18-5)	726	728,0	0,27	726,3	0,04	726,3	0,04
C ₁₂ H ₂₆ (112-40-3)	745	873,0	14,66	746,2	0,16	746,3	0,17
C ₁₆ H ₃₄ (544-76-8)	773	770,0	0,39	769,1	0,51	769,3	0,48
C ₈ H ₁₈ (111-65-9)	698	690,0	1,16	699,4	0,21	699,2	0,18
C ₇ H ₁₆ (591-76-4)	678	674,0	0,59	680,5	0,37	680,2	0,33
C ₇ H ₁₄ (108-87-2)	797,6	766,0	4,13	806,9	1,16	807,3	1,22
C ₁₀ H ₂₀ (1678-93-9)	726	796,0	8,79	736,2	1,41	736,3	1,41
C ₁₀ H ₁₄ (104-51-8)	858	858,0	0,00	863,6	0,65	864,4	0,74
C ₈ H ₁₀ (95-47-6)	877,4	876,0	0,16	861,6	1,80	862,4	1,71
C ₆ H ₆ (71-43-2)	873	873,0	0,00	874,5	0,18	875,4	0,27
C ₇ H ₈ (108-88-3)	862	865,0	0,35	862,6	0,07	863,4	0,16
C ₉ H ₁₂ (103-65-1)	860,9	860,0	0,10	860,6	0,03	861,4	0,05

Химическая формула (CAS №)	Справочные данные [122]	Формула (3.4) [255]		Формула (3.5) [122]		Формула (3.6) [45]	
	ρ_i , кг/м ³	ρ_i , кг/м ³	Δ , %	ρ_i , кг/м ³	Δ , %	ρ_i , кг/м ³	Δ , %
1	2	3	4	5	6	7	8
C ₉ H ₁₂ (108-67-8)	857,4	745,0	15,09	859,6	0,26	860,4	0,34
C ₁₃ H ₂₀ (1078-71-3)	858	853,0	0,59	855,6	0,28	856,4	0,19
C ₁₀ H ₁₂ (119-64-2)	967,3	966,3	0,10	965,1	0,23	966,4	0,09

Из таблицы 3.1 видно, что определение плотности по формуле (3.4) для некоторых углеводородов дает достаточно большое расхождение между расчётными и экспериментальными данными (до 15%). Это объясняется тем, что для данных компонентов не получено достаточное количество экспериментальных значений плотности при различных температурах и поэтому регрессионные коэффициенты определены недостаточно точно. Тем не менее, преимущества данного метода заключается в том, что с его помощью можно вычислять плотность компонентов, для которых нет справочных данных по фактической плотности для фиксированной температуры. Расхождения между данными, полученными по формуле (3.5), и экспериментальными данными не превышали 2 %. Недостатком данного метода является то, что нужно заранее знать плотность компонента при какой-либо фиксированной температуре, что не всегда представляется возможным. Расхождения для формулы (3.6) являются минимальными среди всех методов расчёта плотности, однако для этого также заранее необходимо определить плотность компонента при $T = 20^\circ\text{C}$, что не всегда представляется возможным.

Также было проведено сравнение расчётных данных с экспериментальными данными плотности при изменении температуры в диапазоне $T_{\text{см}} = 20 - 50^\circ\text{C}$ для смесей углеводородов, представленных в таблице 3.2. Состав смеси В/Д задан в объёмных долях, а составы смесей S1 и S2 – в молярных долях.

Таблица 3.2 – Состав смесей углеводородов

CAS №	124-18-5	112-40-3	544-76-8	592-27-8	95-47-6	91-17-8
Формула	C ₁₀ H ₂₂	C ₁₂ H ₂₆	C ₁₆ H ₃₄	C ₈ H ₁₈	C ₈ H ₁₀	C ₁₀ H ₁₈
Название	декан	додекан	изоцетан	2-метилгептан	о-ксилол	декагидронафталин
V/D	50%	-	-	-	-	-
S1 [166]	-	5,8%	34,2%	1,9%	16,3%	41,8%
S2 [166]	-	17,1%	18,4%	3,8%	11,0%	49,7%

Экспериментальные данные по плотности для смесей S1 и S2 были взяты из [71], а данные для смеси V/D были получены в лаборатории НОЦ ГДИ Самарского университета им. Королева в рамках данной работы и представлены в таблице 3.3.

Таблица 3.3 – Экспериментальные данные по плотности смесей углеводородов SU4, SU10 и V/D

	Плотность смеси, кг/м ³			
	20 °C	30 °C	40 °C	50 °C
V/D	798,7	791,6	784,5	777,6

Результаты расчёта плотности смесей и их сравнение с экспериментальными данными показаны на рисунках 3.1 и 3.2. Среднее расхождение по всем трём смесям для расчёта по формуле (3.4) составило 0,9%, а по формулам (3.5) и (3.6) – 2,6%. В связи с этим в дальнейшей работе будет применяться методика расчёта плотности отдельных компонентов углеводородной смеси в зависимости от температуры по формуле (3.4), предложенной в работе [255].

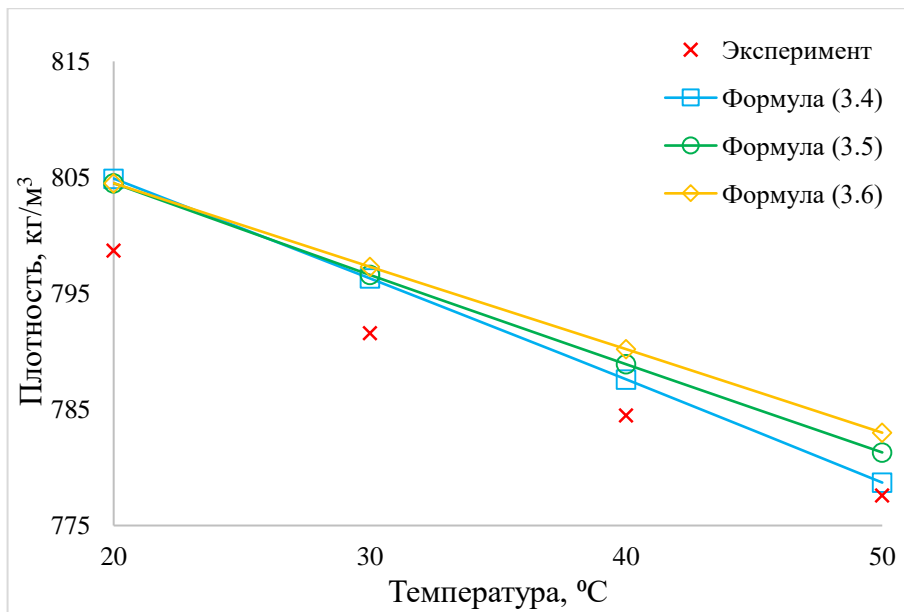
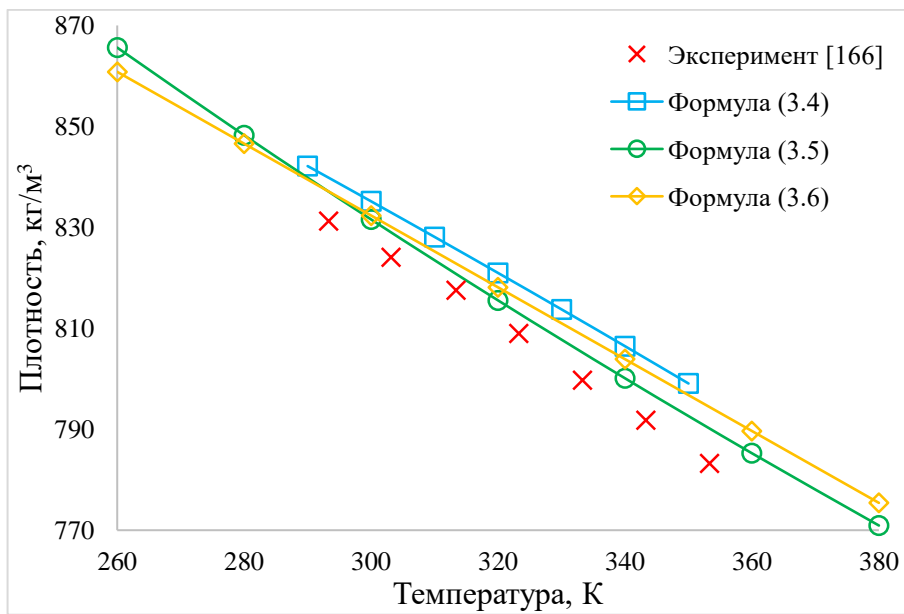
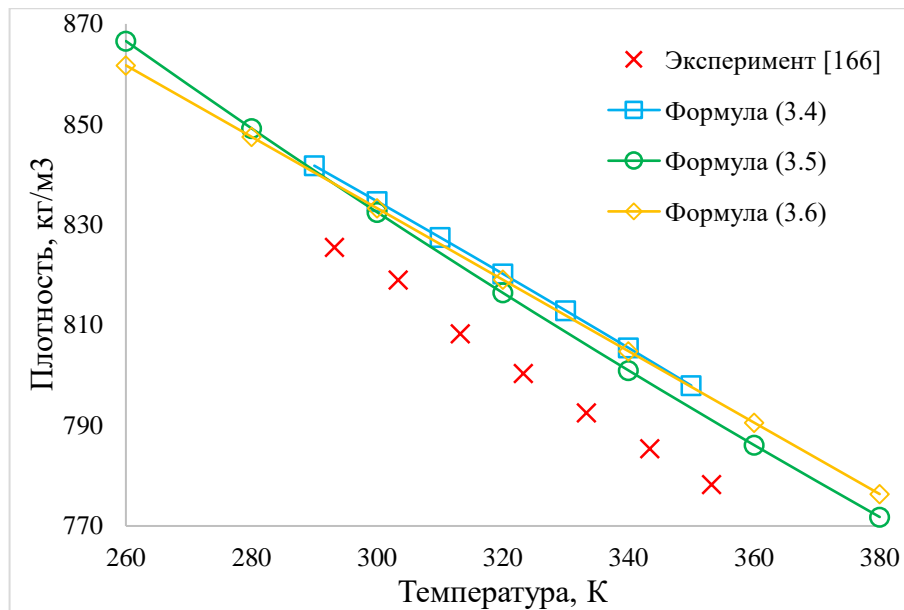


Рисунок 3.1 – Сравнение теоретических методик расчёта плотности с экспериментальными данными для смеси В/D



а)



б)

Рисунок 3.2 – Сравнение теоретических методов расчёта плотности с экспериментальными данными [166]: а) суррогат S1; б) суррогат S2

Расчёт динамической вязкости отдельных компонентов и смеси.

Расчёт динамической вязкости компонентов заданной смеси проводился по формуле (3.9) [226]. Следует отметить, что в известной литературе не было обнаружено других теоретических методов по определению вязкости отдельных углеводородов.

$$\mu_i = 0,001 \cdot 10^{\left(A + \frac{B}{T} + C \cdot T + D \cdot T^2\right)}, \quad (3.9)$$

где μ_i – динамическая вязкость i -го компонента, Па · с;

A, B, C, D – регрессионные коэффициенты i -го компонента;

T – заданная температура, К.

Регрессионные коэффициенты берутся из [226], ориентируясь по химической формуле компонента «FORMULA» или «CASNo».

Расчёт динамической вязкости многокомпонентной смеси проводился по формуле (3.10) из работы [181]:

$$\ln(\mu(T)_{mix}) = \sum \chi_i \cdot \ln(\mu(T)_i) + 0,5 \cdot \sum \sum \chi_i \cdot \chi_j \cdot G_{ij}, \quad (3.10)$$

где $\mu(T)_{mix}$ – динамическая вязкость смеси при заданной температуре, Па · с ;

χ_i, χ_j – молярная доля i -го и j -го компонентов;

$\mu(T)_i$ – динамическая вязкость i -го компонента при заданной температуре, Па · с ;

G_{ij} – параметр бинарного взаимодействия (в данной работе принят равным нулю [181]).

В таблице 3.4 представлены значения теоретических и справочных данных по динамической вязкости для ряда химических компонентов. Из таблицы 3.4 видно, что расхождения между расчётными и экспериментальными данными не превышает 16,4%, а среднее расхождение предлагаемой методики составляет 9,7%.

Таблица 3.4 – Вязкость отдельных химических компонентов при $T = 298$ К

Химическая формула (CAS №)	Справочные данные [160]	Расчётные данные (3.9)	Δ , %
	μ_i , Па·с	μ_i , Па·с	
C10H22 (124-18-5)	0,00101	0,00093	8,41
C12H26 (112-40-3)	0,00141	0,00165	14,57
C16H34 (544-76-8)	0,00314	0,00344	8,82
C8H18 (111-65-9)	0,00051	0,00050	1,43
C7H16 (591-76-4)	0,000352	0,00037	5,96
C7H14 (108-87-2)	0,000687	0,00074	6,82
C10H20 (1678-93-9)	0,001147	0,00135	14,96
C10H14 (104-51-8)	0,000974	0,00102	4,47
C8H10 (95-47-6)	0,000677	0,00081	16,02
C6H6 (71-43-2)	0,000549	0,00066	16,40
C7H8 (108-88-3)	0,000542	0,00059	8,37
C9H12 (103-65-1)	0,000783	0,00084	7,14
C9H12 (108-67-8)	0,000714	0,00078	8,12
C13H20 (1078-71-3)	0,00189	0,00213	11,28
C10H12 (119-64-2)	0,00197	0,00227	13,03

Расчёт динамической вязкости многокомпонентной смеси (μ) проводился для суррогатов, представленных в таблице 3.2. Экспериментальные данные по μ для смесей S1 и S2 были взяты из работы [166], а данные для смеси В/D были

получены в лаборатории НОЦ ГДИ Самарского университета им. Королева в рамках выполнения данной работы и представлены в таблице 3.5 в виде кинематической вязкости $\nu = \mu/\rho$.

Таблица 3.5 – Экспериментальные данные по кинематической вязкости смеси углеводородов В/D

	Кинематическая вязкость, мм ² /с			
	20 °С	30 °С	40 °С	50 °С
В/D	0,8336	0,7226	0,6515	0,6294

Результаты расчёта динамической вязкости исследуемых смесей углеводородов в зависимости от температуры и их сравнение с экспериментальными данными представлены на рисунках 3.3 и 3.4. Среднее расхождение для смеси S1 составляет 7,6%, для S2 – 3,19%, и для В/D – 12,84%. Среднее расхождение для данного метода определения вязкости составляет 7,88%, что является приемлемым для решения поставленных задач. Следует отметить, что данную погрешность можно снизить за счёт применения ненулевого значения параметра бинарного взаимодействия G_{ij} , но в известной литературе нет достаточных данных по этому параметру для всех используемых химических компонентов, поэтому на данном этапе работы этот параметр в формуле (3.10) не учитывался и, как было отмечено выше, принят равным нулю.

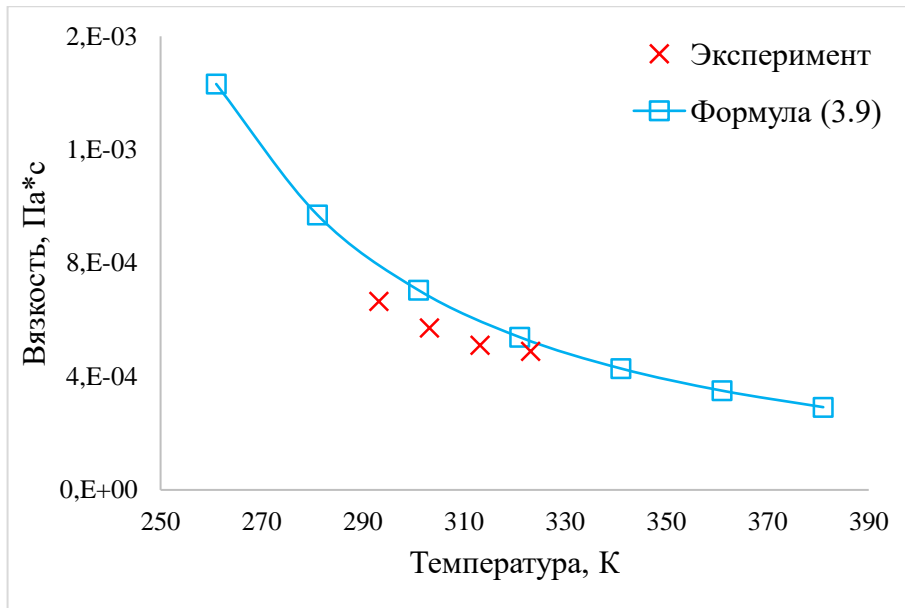
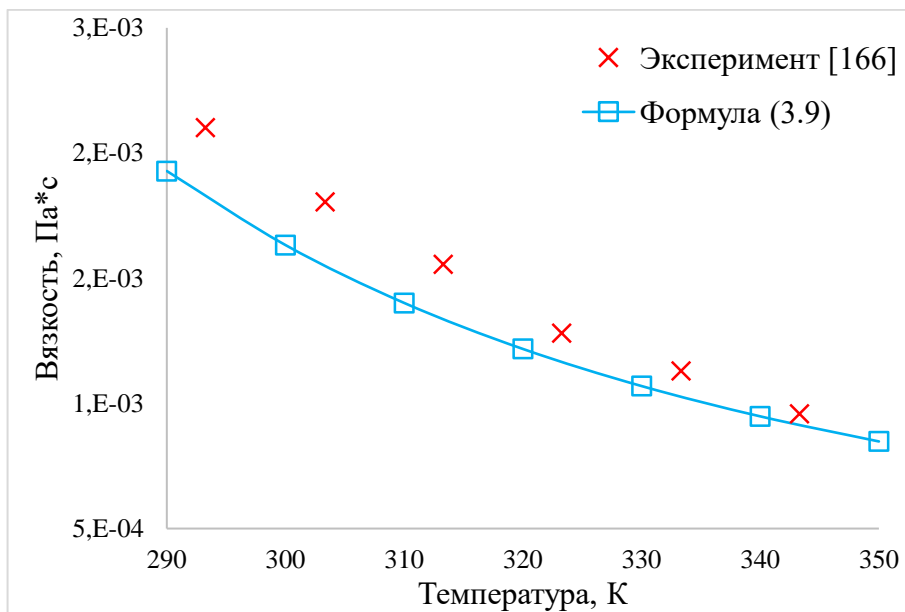
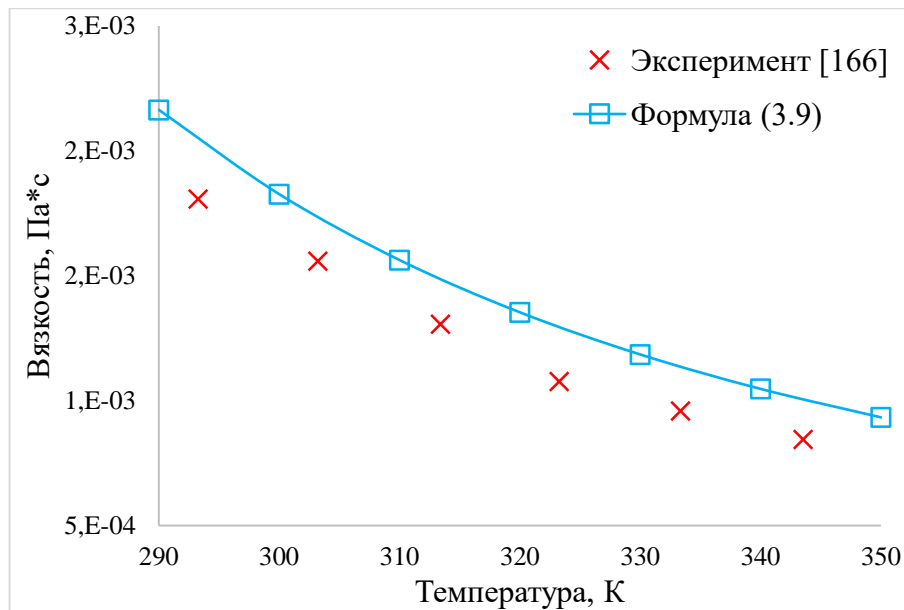


Рисунок 3.3 – Влияние температуры на динамическую вязкость смеси В/D, сравнение расчета по формулам (3.9) и (3.10) с экспериментальными данными



а)



б)

Рисунок 3.4 – Влияние температуры на динамическую вязкость, сравнение расчёта по формулам (3.9) и (3.10) с экспериментальными данными [166]:

а) суррогат S1; б) суррогат S2

Расчёт коэффициента поверхностного натяжения отдельных компонентов и смесей.

Расчёт коэффициента поверхностного натяжения отдельных компонентов смеси в зависимости от температуры проводился по формуле (3.11) из работы [225].

$$\sigma(T)_i = A \cdot \left(1 - \frac{T}{B}\right)^n, \quad (3.11)$$

где $\sigma(T)_i$ – поверхностное натяжение i -го компонента, $\frac{\text{мН}}{\text{м}}$;

A, B, n – регрессионные коэффициенты i -го компонента;

T – заданная температура, К.

Регрессионные коэффициенты берутся из справочника [225]. Расчёт коэффициента поверхностного натяжения заданной многокомпонентной смеси проводился по формуле (3.12) из работы [181]:

$$\sigma(T)_{\text{см}} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta^2 \cdot \left(\frac{\chi_i}{\rho(T)_i}\right) \cdot \left(\frac{\chi_j}{\rho(T)_j}\right) \cdot (\sigma(T)_i \cdot \sigma(T)_j)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.12)$$

где $\sigma(T)_{\text{см}}$ – поверхностное натяжение смеси, $\frac{\text{мН}}{\text{м}}$;

χ_i, χ_j – молярные доли i -го и j -го компонентов;

$\rho(T)_i, \rho(T)_j$ – плотность i -го и j -го компонентов при заданной температуре T ,
 $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$;

$\sigma(T)_i, \sigma(T)_j$ – поверхностное натяжение i -го и j -го компонентов при заданной температуре T , $\frac{\text{мН}}{\text{м}}$;

β – коэффициент, равный:

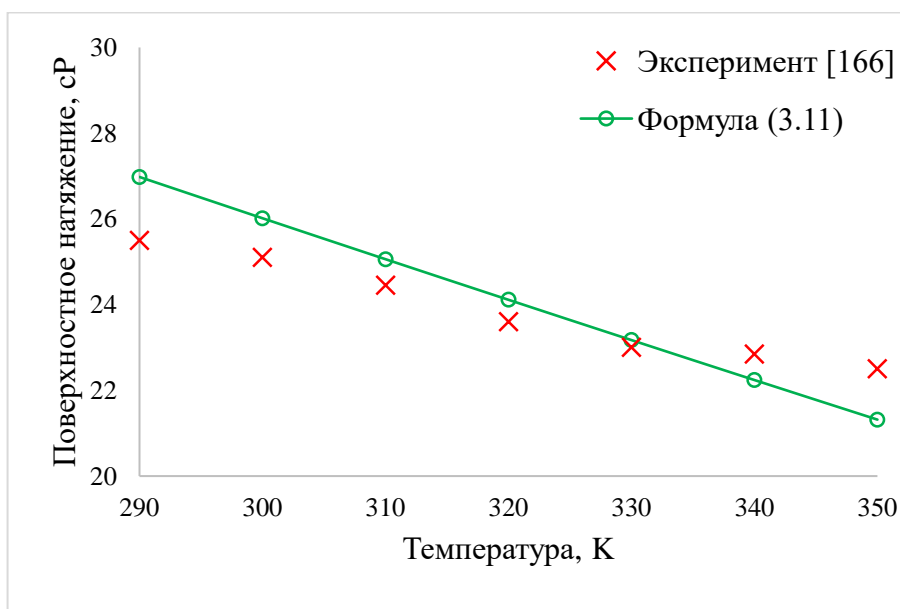
$$\frac{1}{\beta} = \sum_{i=1}^n \frac{\chi_i}{\rho(T)_i}. \quad (3.13)$$

В таблицу 3.6 сведены справочные данные по коэффициенту поверхностного натяжения (σ_i) для отдельных углеводородов, применяемых для формирования суррогатов керосина, а также результаты расчёта σ_i по формуле (3.11) с учётом регрессионных коэффициентов из справочника [225]. Из таблицы 3.6 видно, что данная методика расчёта имеет хорошую прогностическую способность для определения коэффициента поверхностного натяжения индивидуальных углеводородов, при этом отклонение от справочных значений не превышает 4%, за исключением одного компонента (C10H18).

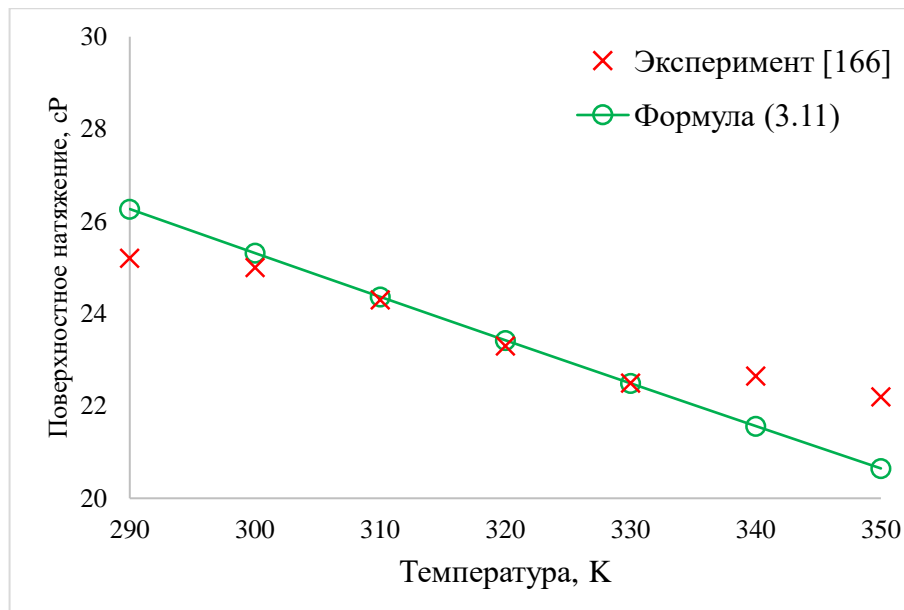
Таблица 3.6 – Коэффициент поверхностного натяжения отдельных химических компонентов при $T = 298 \text{ K}$

Химическая формула (CAS №)	σ_i справочный, мН/м	σ_i расчётный, мН/м	Δ , %
C12H26 (112-40-3)	24,70	24,92	0,87
C16H34 (4390-04-9)	25,10	26,10	3,97
C8H18 (592-27-8)	20,27	20,17	0,51
C7H16 (591-76-4)	18,81	18,81	0,00
C7H14 (108-87-2)	23,15	23,32	0,72
C10H20 (1678-93-9)	26,53	26,53	0,02
C10H14 (104-51-8)	28,71	28,65	0,22
C8H10 (95-47-6)	29,48	29,61	0,45
C6H6 (71-43-2)	28,18	28,22	0,14
C7H8 (108-88-3)	27,29	27,94	2,38
C10H18 (91-17-8)	29,42	24,88	15,44
C9H12 (108-67-8)	28,32	27,52	2,84
C10H12 (119-64-2)	33,16	33,17	0,02

Результаты расчёта коэффициента поверхностного натяжения в зависимости от температуры по формулам (3.11) и (3.12) для смесей углеводородов S1 и S2 из таблицы 3.2 и их сравнение с экспериментальными данными представлены на рисунке 3.5. Расхождение расчётных и экспериментальных данных для обеих смесей составило не более 5%, что является удовлетворительным результатом для данного свойства многокомпонентных жидкостей. Поэтому в дальнейшем коэффициент поверхностного натяжения отдельных компонентов будет определяться по формуле (3.11), а смесей углеводородов по формуле (3.12).



а)



б)

Рисунок 3.5 – Влияние температуры на коэффициент поверхностного натяжения σ_i , сравнение расчёта по формулам (3.11) и (3.12) с экспериментальными данными [166]:

а) суррогат S1; б) суррогат S2

Расчёт свойств смеси, влияющих на нагрев и испарение распыленного топлива

Расчёт критических параметров

Критическим состоянием вещества называется такое, при котором исчезает различие (граница) между его жидкой и паровой фазами, т.е. они имеют одни и те же основные свойства. Для каждого вещества существует такая температура, выше которой оно никаким повышением давления не может быть переведено в жидкость. Эта температура называется критической температурой $T_{кр}$. Давление насыщенных паров, соответствующее критической температуре, называется критическим давлением $p_{кр}$. Объём паров при критической температуре и давлении называется критическим объёмом.

Определение критических параметров индивидуальных компонентов углеводородных смесей базируется на структурной формуле химического вещества. Определение структурной формулы проводится по CASNo компонента, для этого можно обратиться к электронному справочнику WebBook [177] (рисунок 3.6).

Расчёт критических параметров производится по регрессионным формулам из работы [190], в которые входят соответствующие регрессионные коэффициенты a , b , c , d , для параметров $T_{кр}$, $p_{кр}$ и T_k , а также коэффициенты для структурных групп, которые представлены в таблице 3.7 [190].

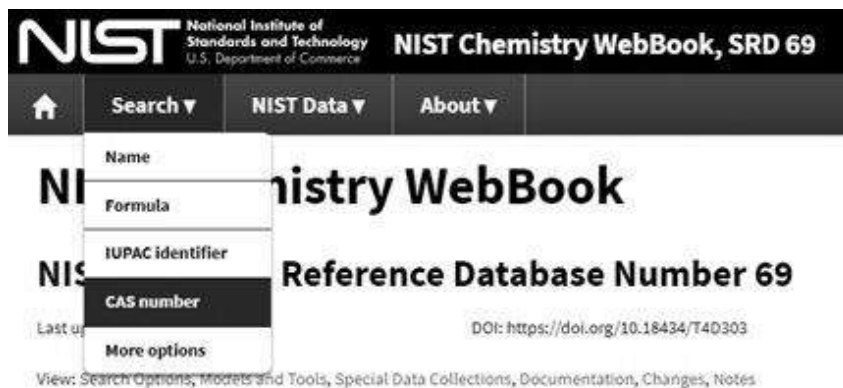


Рисунок 3.6 – Интерфейс электронного справочника WebBook [177]

Таблица 3.7 – Коэффициенты для определения критических параметров [190]

Параметр/группа	$T_k(K)$	$T_{кр}(K)$	$p_{кр}(bar)$
a	50.4965	106.7092	4651.7280
b	0.6591	0.8746	1.1815
c	0.4875	0.4016	-1.0412
d	37.45	101.26	5.28
CH_3	-7.73	-3.0	-0.78
$-CH_2-$	-4.78	-9.16	-0.14
$>CH-$	-8.08	-24.96	0.52
$>C<$	-12.28	-30.90	2.33
$=CH_2$	-8.88	-8.24	0.35
$=CH-$	-4.57	-6.35	-0.95
$=C<$	-4.51	-22.15	-0.47
$=C=$	0.58	15.72	нет
$\equiv CH$	-9.79	-13.22	-4.24
$\equiv CH-$	-3.44	4.64	-4.24
$-CH_2-$ – (кольцо)	-8.39	-8.74	0.21
$>CH-$ – (кольцо)	-13.12	-19.38	0.02
$>C<$ (кольцо)	-27.55	-41.36	1.75
$=CH-$ – (кольцо)	-11.09	-13.41	0.20
$=C<$ (кольцо)	-5.53	-14.68	0.48

Расчёт критической температуры $T_{кр}$ отдельных компонентов заданной смеси проводится по формуле (3.12) [190]:

$$T_{кр} = a \cdot \rho^b \cdot M_i^c + d + \sum_i N_i \cdot G_i, \quad (3.12)$$

где $T_{кр}$ – критическая температура компонента, К;

a, b, c, d – регрессионные коэффициенты;

ρ – плотность компонента при 20°C , $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$;

M_i – молярная масса i -го компонента, $\frac{\text{г}}{\text{моль}}$;

N_i – количество раз, которое i -я группа встречается в компоненте;

G_i – коэффициент для i -й группы.

Расчёт критического давления $p_{кр}$ компонентов заданной смеси проводится по формуле (3.13) [190]:

$$p_{кр} = a \cdot \rho^b \cdot M_i^c + d + \sum_i N_i \cdot G_i, \quad (3.13)$$

где $p_{кр}$ – критическое давление компонента, bar ;

a, b, c, d – регрессионные коэффициенты.

Расчёт температуры кипения отдельных компонентов заданной смеси проводится по формуле (3.14) [190]:

$$T_k = a \cdot \rho^b \cdot M_i^c + d + \sum_i N_i \cdot G_i, \quad (3.14)$$

где T_k – температура кипения компонента, К;

a, b, c, d – регрессионные коэффициенты.

Расчёт критической плотности $\rho_{кр}$ заданной смеси проводится по формуле (3.15) [45]:

$$\rho_{кр} = \varphi_1 \cdot \rho_{п} \cdot g_{п} + \varphi_2 \cdot \rho_{н} \cdot g_{н} + \varphi_3 \cdot \rho_{а} \cdot g_{а}, \quad (3.15)$$

где $\rho_{кр}$ – критическая плотность, $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$;

$g_{п}, g_{н}, g_{а}$ – массовые доли в топливе парафиновых и олефиновых углеводородов (суммарно), нафтеновых углеводородов, ароматических углеводородов соответственно;

$\rho_{п}, \rho_{н}, \rho_{а}$ – критические плотности парафиновых и олефиновых, нафтеновых и ароматических углеводородов при данном числе атомов углерода в молекуле, $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$. Определяются по графикам, представленным на рисунке 3.7;

$\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ – поправочные коэффициенты, учитывающие стерический эффект молекулы, которые в первом приближении можно принимать равными: $\varphi_1 = 1,05$; $\varphi_2 = 1,0$; $\varphi_3 = 0,94$ [45].

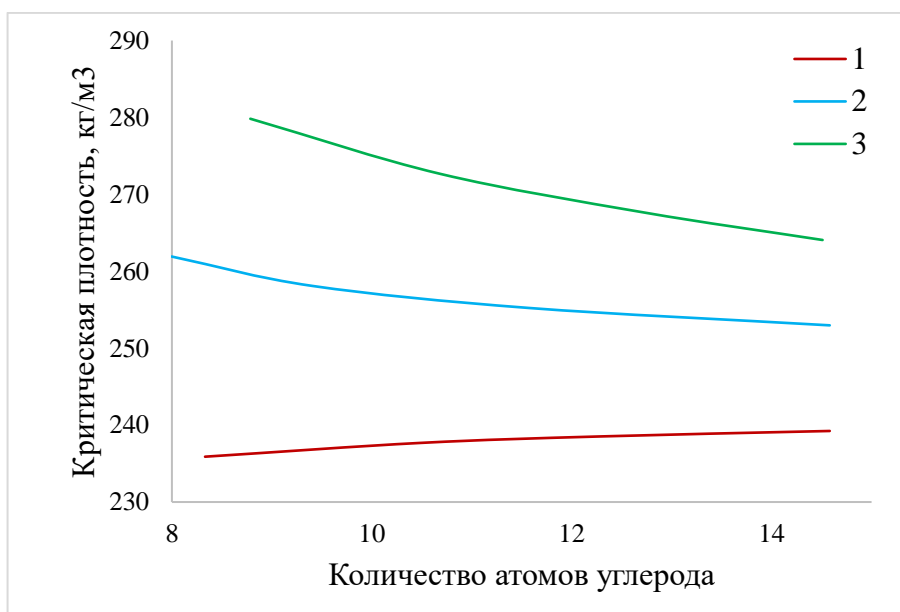


Рисунок 3.7 – График для определения критических плотностей компонентов (1-парафиновых и олефиновых, 2-нафтеновых и 3-ароматических углеводородов) в зависимости от числа атомов углерода n в данном веществе [45]

Расчёт давления насыщенных паров отдельных компонентов и смеси

Исходя из обзора литературы рассмотрим два метода расчёта давления насыщенных паров отдельных углеводородов. Метод, представленный в работе [227], заключается в определении значения давления насыщенных паров по формуле (3.16):

$$\log(p(T)_i) = A - \left(\frac{B}{T+C}\right), \quad (3.16)$$

где $p(T)_i$ – давление насыщенных паров i -го компонента, мм рт. ст.;

A, B, C – регрессионные коэффициенты i -го компонента;

T – заданная температура, К.

Другой метод расчёта давления насыщенных паров отдельного компонента может быть выполнен с помощью номограмм, представленных на рисунке 3.8 [6]. На левой оси необходимо отметить температуру, при которой рассчитывается значение давления насыщенных паров, а на средней оси отметить температуру кипения. Прямая, соединяющая эти две точки, укажет значение давления насыщенных паров на правой оси. Для вычисления значений меньше 0,001 кПа используется формула (3.17) [6]:

$$p(T)_i = p_{s(311K)} \cdot 10^{4,6 - (1430/T)}, \quad (3.17)$$

где $p(T)_i$ – давление насыщенных паров i -го компонента;

$p_{s(311K)}$ – давление насыщенных паров i -го компонента при $T = 311$ К;

T – заданная температура, К.

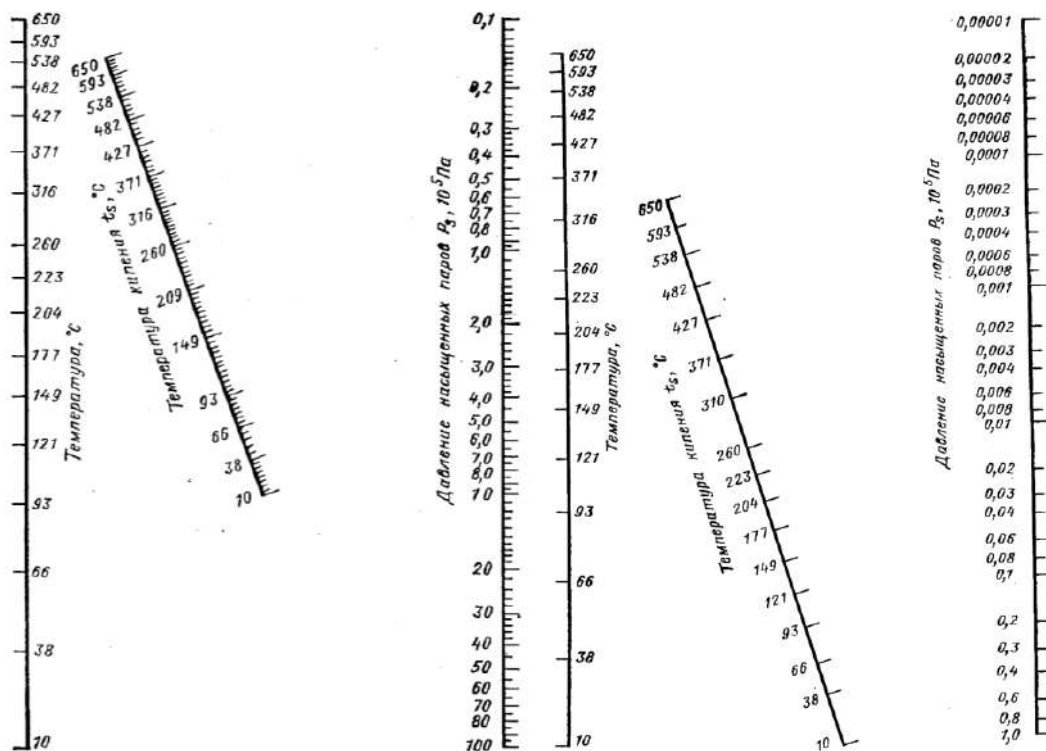


Рисунок 3.8 – Номограмма определения давления насыщенных паров [6]

Расчёт давления насыщенных паров смеси проводится по формуле (3.18) из работы [80]:

$$p(T) = \sum \chi_i \cdot p(T)_i, \quad (3.18)$$

где $p(T)$ – давление насыщенных паров смеси;

$p(T)_i$ – давление насыщенных паров i -го компонента;

χ_i – молярная доля i -го компонента.

В связи с отсутствием в известной литературе регрессионных коэффициентов для многих индивидуальных углеводородов, применяемых для формирования суррогатов керосина, в данной работе был выбран второй метод с использованием номограмм из рисунка 3.8.

Расчёт теплоёмкости отдельных компонентов и смеси

Расчёт удельной теплоёмкости отдельных компонентов заданной смеси выполняется по формуле (3.19) из работы [226].

$$C(T)_i = A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^3, \quad (3.19)$$

где $C(T)_i$ – удельная теплоёмкость i -го компонента, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$;

A, B, C, D – регрессионные коэффициенты i -го компонента;

T – заданная температура, К.

Расчёт удельной теплоёмкости заданной смеси проводится по формуле (3.20) [190]:

$$C(T)_{\text{см}} = \sum_{i=1}^n \chi_i \cdot C(T)_i, \quad (3.20)$$

где $C(T)_{\text{см}}$ – теплоёмкость смеси, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$;

χ_i – молярная доля i -го компонента;

$C(T)_i$ – теплоёмкость i -го компонента при заданной температуре $T \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$.

Валидация метода определения теплоёмкости отдельных компонентов и смеси была проведена для отдельных компонентов и их смесей из работ [158, 229]. Составы данных смесей углеводородов представлены в таблице 3.8 в молярных долях.

Таблица 3.8 – Состав смесей для валидации метода расчёта теплоёмкости

	C10H22 (124-18-5)	C12H26 (112-40-3)	C7H8 (108-88-3)	C8H18 (540-84-1)	C8H18 (592-13-2)
First generation surrogate	42,7%	-	24,3%	33%	-
Present surrogate	-	50,9%	27,2%	-	21,9%

В таблицу 3.9 сведены расчётные значения (по формуле 3.19) теплоёмкости отдельных компонентов для смесей углеводородов из таблицы 3.8 и дано расхождение этих величин со справочными данными [158]. Отклонение расчётных и справочных данных не превышает 3%.

Таблица 3.9 – Теплоёмкость компонентов суррогатов Firstgenerationsurrogate и Presentsurrogate

Химическая формула (CAS №)	C_i справочное, кДж/кг·К	C_i расчётное, кДж/кг·К	Δ , %
C10H22 (124-18-5)	2,174	2,193	0,87
C12H26 (112-40-3)	2,137	2,199	2,90
C14H30 (629-59-4)	2,174	2,196	0,99
C16H34 (544-76-3)	2,168	2,202	1,58
C8H18 (540-84-1)	-	2,022	-
C7H8 (108-88-3)	1,714	1,701	0,77
C8H18 (592-13-2)	-	2,199	-

Результаты расчёта удельной теплоёмкости для смесей углеводородов (см. таблицу 3.8) представлены на рисунке 3.9. Среднее расхождение между расчётными и экспериментальными данными для смесей Firstgenerationsurrogate и смеси Presentsurrogate не превышает 5 %, что является удовлетворительным результатом, поэтому, теплоёмкость отдельных углеводородов в данной работе будет определяться по формуле (3.19).

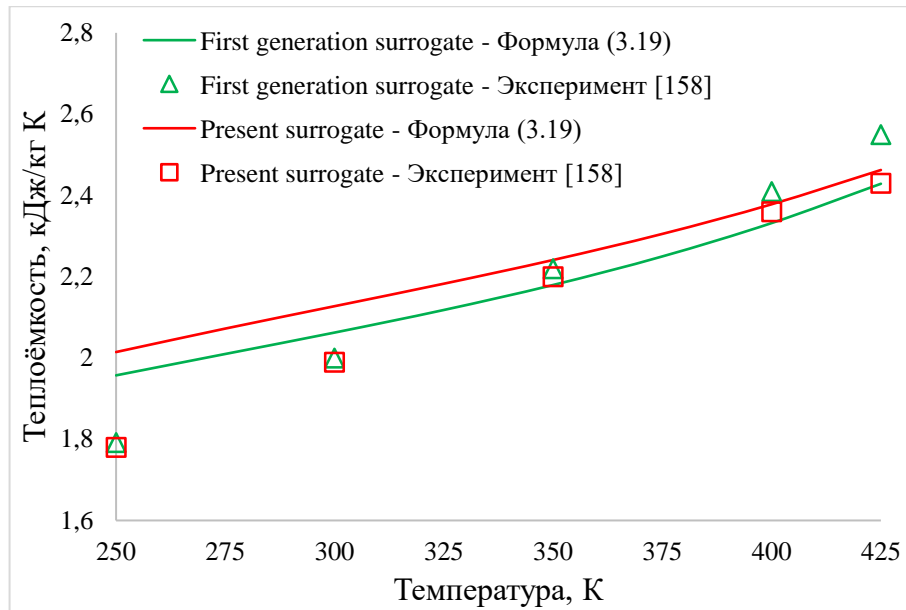


Рисунок 3.9 – Влияние температуры на удельную теплоёмкость смеси углеводородов Firstgenerationsurrogate и Presentsurrogate, сравнение расчёта по формулам (3.19) и (3.20) со справочными данными из работы [158]

Расчёт теплопроводности отдельных компонентов и смеси

Расчёт теплопроводности компонентов заданной смеси проводился по формуле (3.21) из работы [227].

$$k(T)_i = A + B \cdot T + C \cdot T^2, \quad (3.21)$$

где $k(T)_i$ – теплопроводность i -ого компонента, $\frac{\text{Вт}}{\text{м}\cdot\text{К}}$;

A, B, C – регрессионные коэффициенты i -го компонента;

T – заданная температура, К.

Расчёт теплопроводности смеси проводился по формуле (3.22) [190]:

$$k(T)_{\text{см}} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \Phi_i \Phi_j \cdot \frac{2 \cdot k_i k_j}{k_i + k_j}, \quad (3.22)$$

где $k(T)_{\text{см}}$ – теплопроводность смеси, $\frac{\text{Вт}}{\text{м}\cdot\text{К}}$;

k_i, k_j – теплопроводность i -го и j -го компонентов;

Φ_i, Φ_j – параметр, равный:

$$\Phi_i = \frac{\frac{\chi_i}{\rho(T)_i}}{\sum_{j=1}^n \frac{\chi_j}{\rho(T)_j}}; \quad (3.23)$$

χ_i, χ_j – молярные доли i -го и j -го компонентов;

$\rho(T)_i, \rho(T)_j$ – плотность i -го и j -го компонентов, $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$.

Валидация предлагаемого метода определения теплопроводности компонентов и смеси проводилась для смесей Firstgenerationsurrogate и Presentsurrogate (см. таблицу 3.8). В таблице 3.10 представлены расчётные значения теплопроводности отдельных углеводородов и их сравнение со справочными данными из работы [158]. Данный метод показал среднее расхождение в 1,7%, что является допустимым расхождением для поставленных задач.

Таблица 3.10 – Теплопроводность отдельных углеводородов при $T = 293 \text{ К}$

Химическая формула (CASNo)	k_i справочное, Вт/м·К	k_i расчетное, Вт/м·К	Δ , %
C10H22 (124-18-5)	0,133	0,136	2,09%
C12H26 (112-40-3)	0,137	0,141	3,00%
C14H30 (629-59-4)	0,139	0,137	1,44%
C16H34 (544-76-3)	0,143	0,141	1,40%
C8H18 (540-84-1)	-	0,098	-
C7H8 (108-88-3)	0,134	0,134	0,30%
C8H18 (592-13-2)	-	0,111	-

На рисунке 3.10 представлены результаты расчёта теплопроводности для суррогатов Firstgenerationsurrogate и Presentsurrogate (см. табл. 3.8) и показано их сравнение с экспериментальными данными из работы [229]. Среднее расхождение для суррогата Firstgenerationsurrogate составляет 12 %, а для Presentsurrogate – 1%, что является приемлемым для использования предложенной методики определения теплоёмкости в рамках задач данного исследования. Таким образом,

теплопроводность отдельных углеводородов в дальнейшем будет определяться по формуле (3.21), а смеси углеводородов по формуле (3.22).

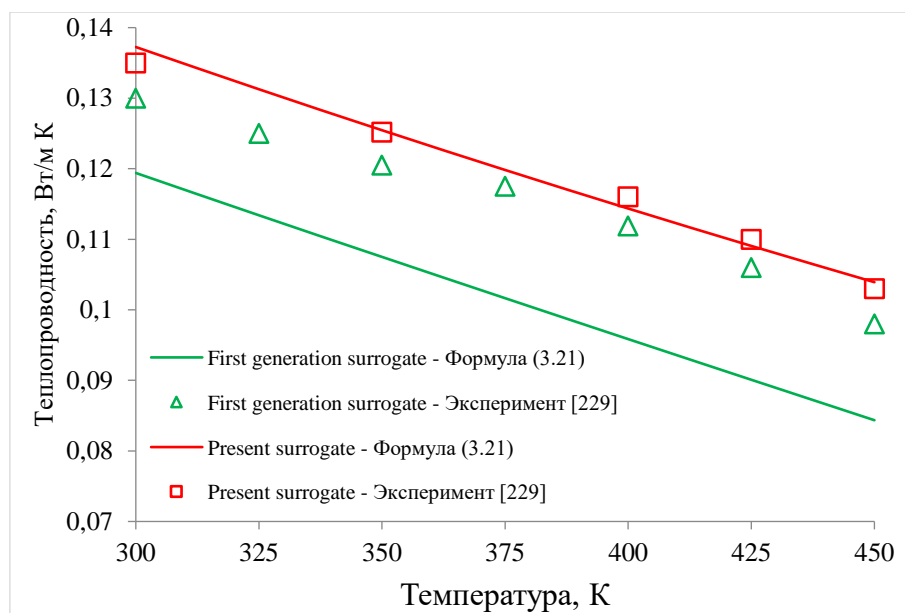


Рисунок 3.10 – Влияние температуры на теплопроводность смеси углеводородов Firstgenerationsurrogate и Presentsurrogate, сравнение расчёта по формулам (3.21) и (3.22) с экспериментальными данными из работы [229]

Расчёт свойств смеси, влияющих на горение испаренной смеси

Расчёт низшей теплотворной способности отдельных компонентов и смеси

Расчёт H_u отдельных компонентов может осуществляться по различным методикам. Первая из них – по формуле Менделеева [45], которая имеет следующий вид:

$$Hu_i = 33,91 \cdot \frac{M_C \cdot C}{M_C \cdot C + M_H \cdot H} + 125,6 \cdot \frac{M_H \cdot H}{M_C \cdot C + M_H \cdot H}, \quad (3.24)$$

где Hu_i – низшая теплотворная способность топлива, $\frac{\text{МДж}}{\text{кг}}$;

M_C, M_H – молярная масса углерода и водорода, соответственно, $\frac{\text{гр}}{\text{моль}}$;

C, H – количество атомов углерода и водорода в i -м компоненте.

Вторая методика заключается в определении H_u через энтальпию образования [38]:

$$Hu_i = [(H_{C_m H_n N_x O_y S_z}^R + H_{O_2}^R + H_{N_2}^R + H_{CO_2}^R + H_{H_2O}^R + H_{Ar}^R) - (H_{CO_2}^P + H_{H_2O}^P + H_{N_2}^P + H_{SO_2}^P + H_{Ar}^P)] \cdot \frac{1000}{M_i} \cdot 1 \times 10^{-6} + N_{H_2O}^P \cdot E_{H_2O} \cdot \frac{1000}{M_i} \cdot 1 \times 10^{-6}, \quad (3.25)$$

где Hu_i – низшая теплотворная способность i -го компонента, $\frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$;

$H_{C_m H_n N_x O_y S_z}^R, H_{O_2}^R, H_{N_2}^R, H_{CO_2}^R, H_{H_2O}^R, H_{Ar}^R$ – энтальпия топлива, кислорода, азота, диоксида углерода, водяных паров и аргона в реагентах в стехиометрическом уравнении, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$;

$H_{CO_2}^P, H_{H_2O}^P, H_{N_2}^P, H_{SO_2}^P, H_{Ar}^P$ – энтальпия диоксида углерода, воды, азота, диоксида серы и аргона в продуктах в реагентах в стехиометрическом уравнении, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$;

M_i – молекулярный вес i -го компонента, $\frac{\text{г}}{\text{моль}}$;

$N_{H_2O}^P$ – количество молей воды в продуктах в стехиометрическом уравнении;

E_{H_2O} – затраты энергии на конденсацию 1 моль воды, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$.

Третий метод определения H_u осуществляется по эмпирическому выражению из работы [113], которое имеет следующий вид:

$$Hu_i = 4,832 \cdot \frac{H}{C} + 37,274, \quad (3.26)$$

где Hu_i – низшая теплотворная способность i -го компонента, $\frac{\text{МДж}}{\text{кг}}$;

$\frac{H}{C}$ – отношение числа атомов водорода к числу атомов углерода в i -м компоненте.

Для упрощения расчётов в данной работе H_u отдельных углеводородов будет определяться по формуле (3.24), а расчёт H_u заданной смеси углеводородов будет проводиться по формуле из работы [127]:

$$Hu_{mix} = \sum y_i \cdot Hu_i, \quad (3.27)$$

где Hu_{mix} – низшая теплотворная способность смеси, $\frac{\text{кДж}}{\text{кг}}$;

y_i – массовая доля i -го компонента;

Hu_i – низшая теплотворная способность i -го компонента, $\frac{\text{кДж}}{\text{кг}}$.

Расчёт молекулярного веса отдельных компонентов и смеси

Для углеводорода с известной химической формулой молярная масса определяется как масса молекулы вещества. Для этого берётся стандартный атомный вес элементов, входящих в молекулу, умножается на количество атомов соответствующего элемента в молекуле и умножается на 1 г/моль, константу молярной массы.

$$M_i = M_C \cdot C + M_H \cdot H, \quad (3.28)$$

где M_i – молярная масса i -го компонента, $\frac{\text{г}}{\text{моль}}$;

M_C, M_H – молярная масса углерода и водорода, соответственно, $\frac{\text{гр}}{\text{моль}}$;

C, H – количество атомов углерода и водорода в i -м компоненте.

Для смеси углеводородов известного состава расчёт молярной массы будет проводиться по формуле:

$$M_{\text{см}} = \sum \chi_i \cdot M_i, \quad (3.29)$$

где $M_{\text{см}}$ – молярная масса смеси, $\frac{\text{г}}{\text{моль}}$;

M_i – молярная масса i -го компонента, $\frac{\text{г}}{\text{моль}}$;

χ_i – молярная доля i -ого компонента смеси.

Расчёт молярного отношения водорода к углероду отдельных компонентов и смеси

Расчёт Н/С компонентов заданной смеси проводится по формуле (3.30), а для смесей углеводородов – по формуле (3.31):

$$H/C_i = H/C, \quad (3.30)$$

где H/C_i – молярное отношение водорода к углероду i -го компонента;

C, H – количество атомов углерода и водорода в i -м компоненте.

$$H/C_{\text{см}} = \frac{\sum \left(\frac{H \cdot M_H \cdot y_i}{M_i} \right)}{M_H} / \frac{\sum \left(\frac{C \cdot M_C \cdot y_i}{M_i} \right)}{M_C}, \quad (3.31)$$

где $H/C_{см}$ – молярное отношение водорода к углероду заданной смеси;
 y_i – массовая доля i -го компонента смеси;
 M_C, M_H – молярная масса углерода и водорода, соответственно, $\frac{гр}{моль}$.

Расчёт цетанового числа отдельных компонентов и смеси

Цетановое число – это показатель самовоспламеняемости топлива. Численно он равен такому содержанию цетана (%) в смеси с альфа-метилнафталином, при котором самовоспламенение этой смеси и сравниваемого с ней испытуемого топлива одинаково. Цетановое число (DCN) каждого компонента, используемого при формировании суррогатов керосина, определялось на основании данных, представленных в работах [6, 80, 160] и сведённых в таблицу 3.11.

Таблица 3.11 – Значение DCN для отдельных компонентов

CAS #	Формула компонента	Формула компонента	DCN	Источники
124-18-5	C10H22	n-decane	66.35	[6]
112-40-3	C12H26	n-dodecane	73.45	[6]
629-59-4	C14H30	n-tetradecane	90.05	[6]
111-65-9	C8H18	n-octane	61.3	[6]
540-84-1	C8H18	iso-octane	18.9	[6]
591-76-4	C7H16	2-methylhexane	43.5	[6]
4390-04-9	C16H34	iso-cetane	14.62 5	[6]
108-87-2	C7H14	methylcyclohexane	22.47 5	[6]
1678-93-9	C10H20	butylcyclohexane	47.8	[6]
104-51-8	C10H14	butylbenzene	12.45	[6]
95-47-6	C8H10	o-xylene	8.3	[160]
71-43-2	C6H6	benzene	14.3	[80]
108-88-3	C7H8	Toluene	6	[160]
103-65-1	C9H12	n-Propylbenzene	8.9	[227]
108-67-8	C9H12	1,3,5-Trimethylbenzene	8	[160]
592-27-8	C8H18	2-methylheptane	49.8	[6]
91-17-8	C10H18	Decalin	36.2	[6]

Расчёт цетанового числа заданной смеси углеводородов (суррогата керосина) проводился по формуле из работы [160]:

$$DCN_{см} = \sum V_i \cdot DCN_i, \quad (3.32)$$

где $DCN_{см}$ – цетановое число смеси углеводородов;

V_i – объемная доля i -го компонента в смеси;

DCN_i – DCNi-го компонента.

Расчёт порогового индекса сажеобразования отдельных компонентов и смеси

Пороговый индекс сажеобразования используется для количественной оценки тенденции топлива к образованию сажи, он линейно коррелирует с соотношением молекулярной массы топлива и числа дымления (SmokePoint – SP) в диффузионном пламени. Пороговый индекс сажеобразования (TSI) каждого компонента, используемого при формировании суррогатов керосина, определялся на основании данных, представленных в работах [106, 126, 171, 179] и сведенных в таблицу 3.12. Расчёт TSI заданной смеси проводился по формуле (3.33) [148].

Таблица 3.12 – Значение TSI для отдельных компонентов

CAS #	Формула компонента	Название компонента	TSI	Источник
124-18-5	C10H22	n-decane	5,4	[171]
112-40-3	C12H26	n-dodecane	7	[171]
629-59-4	C14H30	n-tetradecane	33.83	[106]
111-65-9	C8H18	n-octane	3.2	[106]
540-84-1	C8H18	iso-octane	5.6	[106]
591-76-4	C7H16	2-Methylhexane	3.2	[106]
4390-04-9	C16H34	iso-cetane	22	[171]
108-87-2	C7H14	methylcyclohexane	6.4	[171]
1678-93-9	C10H20	butylcyclohexane	17.16	[126]
104-51-8	C10H14	butylbenzene	54.5	[106]
95-47-6	C8H10	o-xylene	47.6	[179]
71-43-2	C6H6	benzene	31	[171]
108-88-3	C7H8	Toluene	40	[171]
103-65-1	C9H12	n-Propylbenzene	52	[171]
108-67-8	C9H12	1,3,5-Trimethylbenzen	61	[171]
592-27-8	C8H18	2-methylheptane	3.5	[106]
91-17-8	C10H18	Decalin	22	[171]

$$TSI_{см} = \sum \chi_i \cdot TSI_i, \quad (3.33)$$

где $TSI_{см}$ – порог сажеобразования смеси;

TSI_i – порог сажеобразования i -го компонента смеси;

χ_i – молярная доля i -го компонента смеси.

3.2 Совершенствование методики формирования суррогатов керосина

Разрабатываемая в данной работе новая методика формирования многокомпонентных суррогатов углеводородных топлив должна отличаться от существующих учётом свойств жидкостей, влияющих на характеристики распыла, а также нагрева и испарения капель. Алгоритм формирования суррогата керосина с учетом поставленной задачи реализован на основе итерационного процесса и представлен на рисунке 3.11.

На первом этапе подбирается «исходный» состав смеси (в молярных долях) из 40 наиболее часто используемых углеводородных компонентов, представленных в сформированной в рамках данной работы базе данных, которая получена на основе обзора существующих суррогатов авиационного керосина (глава 1, таблица 1.4). Ограничения на компоненты, из которых может быть составлена смесь углеводородов, были наложены исходя из наличия этих компонентов в детальных кинетических механизмах, а также их доступности для экспериментальных исследований. Эта «исходная» смесь состоит примерно из 8–10 различных компонентов.

На втором шаге определяются массовые и объёмные доли компонентов, а также рассчитываются соответствующие свойства смеси (свойства, влияющие на распыл – плотность, вязкость, поверхностное натяжение; свойства, влияющие на нагрев и испарение – давление насыщенных паров, кривая дистилляции, теплоёмкость и теплопроводность; свойства, влияющие на горение испарённого топлива – молекулярный вес MW , отношение H/C , цетановое число DCN , пороговый индекс сажеобразования TSI , низшая теплотворная способность H_u) по методикам, представленным в разделе 3.1 настоящей работы.

На третьем шаге проводится сравнение физико-химических свойств смеси (суррогата углеводородного топлива, например керосина) со свойствами моделируемого топлива. Для обеспечения требуемых характеристик распыла, нагрева и испарения капель топлива при моделировании рабочего процесса камер сгорания ГТД с использованием разрабатываемого суррогата все свойства были разделены на приоритетные и вторичные. Для формирования состава суррогата использовался метод оптимизации. При оптимизации состава смеси в качестве параметров использовались концентрации химических компонентов, в качестве критерия оптимизации – суммарное расхождение между рассчитанными и целевыми свойствами топлива. Для определения суммарного расхождения каждому свойству был присвоен весовой коэффициент в зависимости от приоритетности свойства: большие весовые коэффициенты присваивались приоритетным свойствам, более низкие весовые коэффициенты присваивались второстепенным свойствам. При этом сами значения весовых коэффициентов определялись экспертно исходя из назначения суррогата.

Расхождения по свойствам рассчитываются следующим образом:

$$E_{p_i} = \frac{P_f - P_s}{P_f} * 100 , \quad (3.34)$$

где E_{p_i} – расхождение определенного свойства для i -й итерации;

P_s – значение свойства суррогата;

P_f – значение целевого свойства топлива.

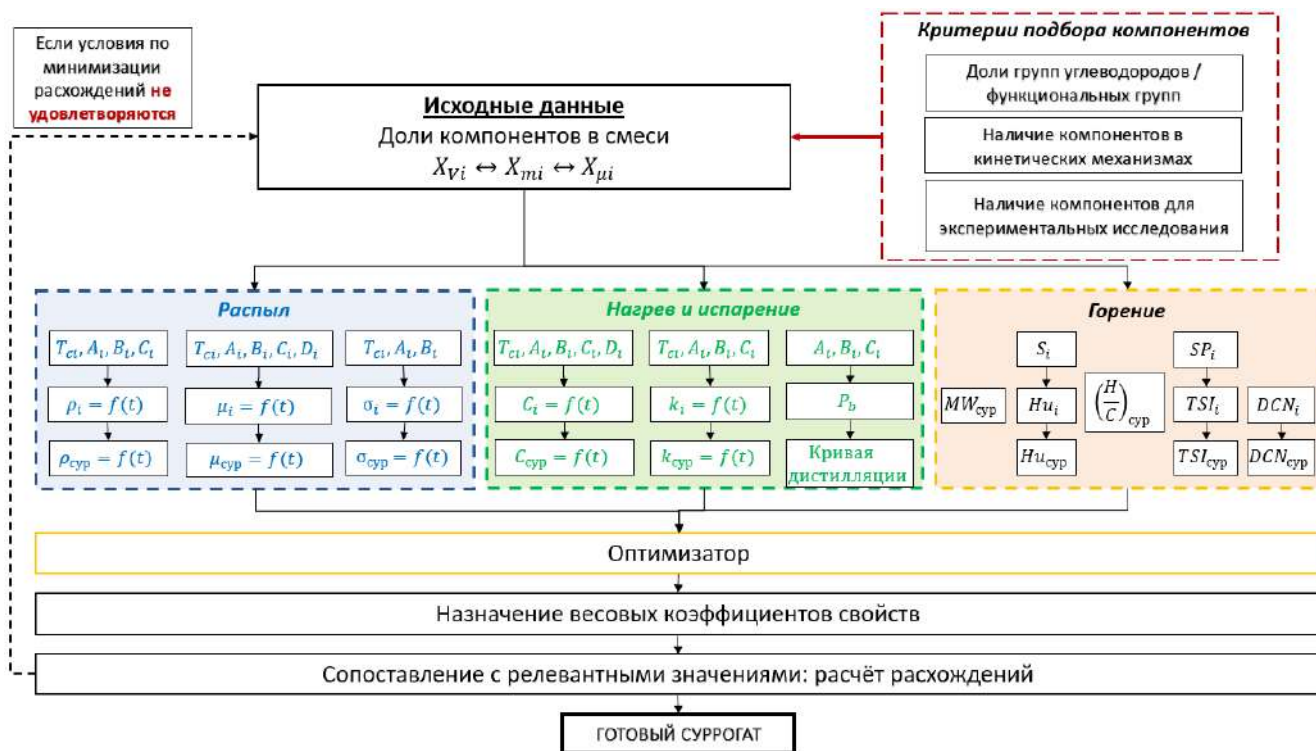


Рисунок 3.11 – Алгоритм формирования суррогата углеводородного топлива

В рамках реализации данного алгоритма формирования суррогата углеводородного топлива (например авиационного керосина) была разработана программа для ЭВМ и получено свидетельство о регистрации программы [69]. Основные результаты по разработке и применению данной методики формирования суррогатов опубликованы в работах автора [82, 83, 85, 150, 175].

3.3 Формирование суррогата авиационного керосина для моделирования рабочего процесса в КС ГТД с учётом процессов нагрева и испарения капель многокомпонентных углеводородных топлив

На основе разработанного в разделе 3.2 алгоритма (рисунок 3.11) с использованием авторской программы для ЭВМ [69] и реализации поставленных задач исследования было сформировано четыре варианта суррогатов авиационного керосина марки ТС-1, обозначенных как SU4 [162], SU10 [71] и SU11 [71]. В таблице 3.13 приведены их составы (массовые доли химических компонентов).

Таблица 3.13 – Массовые доли компонентов суррогатов

CAS No.	124-18-5	4390-04-9	119-64-2	108-87-2	95-47-6	1678-93-9	71-43-2
Формула	C ₁₀ H ₂₂	C ₁₆ H ₃₄	C ₁₀ H ₁₂	C ₇ H ₁₄	C ₈ H ₁₀	C ₁₀ H ₂₀	C ₆ H ₆
Название	декан	изоцетан	тетралин	метилциклогексан	о-ксилол	бутилциклогексан	бензол
SU4	52,7%	20,60%	16,20%	10,50%			
SU10	47,6%			36,6%	15,7%		
SU11	27,8%			36,1%		28,1%	8,0%

Как видно из таблицы 3.13, были получены два четырёхкомпонентных суррогата (SU4 и SU11) и один трёхкомпонентный. Все новые суррогаты включают в себя декан (C₁₀H₂₂), который сам по себе является распространённым суррогатом керосина из-за его физико-химических свойств: его химическая формула и молекулярная масса близки к керосину [160]. Также присутствует метилциклогексан (C₇H₁₄), которым часто заменяют группы циклоалканов в составе керосина при создании химического суррогата [160]. Изоцетан (C₁₆H₃₄) используется в SU4. На практике при создании химических суррогатов керосина используются более тяжелые компоненты, чем декан, для более быстрой декомпозиции на мелкие углеводороды [166]. В таблице 3.14 приведены характеристики авиационного керосина марки ТС-1, а также характеристики всех разработанных суррогатов. В скобках указаны абсолютные значения расхождений между значениями свойств суррогата и значениями, полученными экспериментально для ТС-1.

Таблица 3.14 – Сравнение характеристик авиационного керосина марки ТС-1 (исходные экспериментальные данные) с характеристиками суррогатов SU4, SU10 и SU11 (исходные численные результаты)

Свойство	Референтные значения	SU4	SU10	SU11
	ТС-1			
1	2	3	4	5
Плотность ρ (20°C), кг/м ³	0,786	0,783 (0,39%)	0,766 (2,54%)	0,774 (1,52%)
Вязкость μ (20°C), мПа с	1,504	1,118 (25,66%)	0,821 (45,41%)	0,882 (41,36%)

Свойство	Референтные значения	SU4	SU10	SU11
	ТС-1			
1	2	3	4	5
Поверхностное натяжение σ (20°C), мН/м	24,3	25,85 (6,38%)	24,81 (2,10%)	25,09 (3,25%)
Теплоёмкость C (54°C), Дж/(моль К)	294,86	303,8 (3,26%)	237,1 (19,59%)	216,8 (26,47%)
Теплопроводность k (45°C), Вт/(м К)	0,1099	0,1239 (12,73%)	0,1189 (8,19%)	0,120 (9,19%)
H/C	1,969	1,963 (0,31%)	1,969 (0,02%)	1,969 (0,02%)
MW	144	144,2 (0,14%)	116,8 (18,89%)	115,5 (19,79%)
DCN	41,7	42,50 (1,92%)	42,41 (1,70%)	41,71 (0,02%)
TSI	21,48	18,03 (1,56%)	13,15 (38,78%)	7,59 (64,66%)
Hu, МДж/кг	43,36	43,65 (0,67%)	43,76 (0,92%)	43,74 (0,88%)
Среднее расхождение по всем свойствам		5,3%	13,81%	16,72%

Из таблицы 3.14 видно, что среднее расхождение по всем свойствам минимальны для суррогата SU4. Суррогат SU4 показывает наименьшие расхождения по свойствам, влияющим на распыл, за исключением значения поверхностного натяжения. Также SU4 имеет лучшие показатели по свойствам, влияющим на нагрев и испарение: расхождение по теплоёмкости на порядок ниже у SU4, а расхождение по теплопроводности примерно одинаковое для трёх суррогатов. По значению молекулярной массы MW и индекса сажеобразования TSI SU4 превосходит суррогаты SU10 и SU11. Такое расхождение суррогатов SU10 и SU11 объясняется тем, что они состоят из компонентов, для которых нет достаточно точных регрессионных коэффициентов (например о-ксилол). Кроме того, использование легких углеводородов в суррогатах как правило снижает значение свойств горения, что собственно и получается с SU10 и SU11.

Также проводилось сравнение новых суррогатов с ранее разработанными – с шестикомпонентным суррогатом SU1 и четырёхкомпонентным суррогатом SU2, которые были получены с учётом свойств горения и полностью игнорировали свойства, влияющие на распыл, нагрев и испарение. Состав суррогатов SU1 и SU2 представлен в таблице 3.15. В данных суррогатах используется додекан как самый тяжёлый углеводород, в отличие от новых суррогатов, в которых используется изоцетан. В таблице 3.16 представлено сравнение характеристик керосина марки ТС-1 с характеристиками суррогатов SU1, SU2 и SU4. В скобках указаны абсолютные значения расхождений между значениями свойств суррогата и значениями, полученными экспериментально для ТС-1.

Таблица 3.15 – Массовые доли компонентов суррогатов SU1 и SU2

CAS No.	124-18-5	112-40-3	4390-04-9	108-87-2	1678-93-9	95-47-6	119-64-2	71-43-2
Формула	C ₁₀ H ₂₂	C ₁₂ H ₂₆	C ₁₆ H ₃₄	C ₇ H ₁₄	C ₁₀ H ₂₀	C ₈ H ₁₀	C ₁₀ H ₁₂	C ₆ H ₆
Название	декан	додекан	изоцетан	метилциклогексан	бутилциклогексан	о-ксилол	1,2,3,4-тетрагидро нафталин	бензол
SU1	28,3%	19,3%	14,9%	19,9%		11,4%	6,3%	
SU2	18,8%	38,5%			25,7%			16,9%

Таблица 3.16 – Сравнение характеристик авиационного керосина марки ТС-1 (исходные экспериментальные данные) с характеристиками суррогатов SU1, SU2 и SU4 (исходные численные результаты).

Свойство	Референтные значения	SU 4	SU 1	SU 2
	ТС-1			
1	2	3	4	5
Плотность ρ (20°C), кг/м ³	0,786	0,783 (0,39%)	0,775 (1,40%)	0,777 (0,90%)
Вязкость μ (20°C), мПа с	1,504	1,118 (25,66%)	1,006 (33,11%)	1,093 (27,33%)
Поверхностное натяжение σ (20°C), мН/м	24,3	25,85 (6,38%)	25,62 (5,43%)	26,37 (8,52%)
Теплоёмкость C (54°C), Дж/(моль К)	294,86	303,8 (3,26%)	285,0 (3,34%)	279,8 (5,12%)

Свойство	Референтные значения	SU 4	SU 1	SU 2
	ТС-1			
1	2	3	4	5
Теплопроводность k (45°C), Вт/(м К)	0,1099	0,1239 (12,73%)	0,1218 (10,83%)	0,1305(18,74%)
H/C	1,969	1,963 (0,31%)	1,963 (0,31%)	1,918 (2,59%)
MW	144	144,2 (0,14%)	136,1 (5,49%)	131,8 (8,47%)
DCN	41,7	42,50 (1,92%)	42,77 (2,57%)	56,74 (36,07%)
TSI	21,48	18,03 (1,56%)	15,67 (27,05%)	3,68 (82,87%)
Hu, МДж/кг	43,36	43,65 (0,67%)	43,70 (0,78%)	43,65 (0,67%)
Среднее расхождение по всем свойствам		5,3%	9,03%	19,13%

Из таблицы 3.15 видно, что суррогаты SU1 и SU2 хуже имитируют практически все физико-химические свойства керосина. Наихудший из всех оказался суррогат SU2, у которого наибольшее среднее расхождение. Абсолютное расхождение свойств горения SU2 на порядок выше, чем у других суррогатов. Отсюда следует, что представленная в данной работе методика существенно повышает точность определения физико-химических свойств смесей углеводородов, и что с её помощью формируются более качественные суррогаты авиационного керосина.

Из анализа данных таблиц 3.14 и 3.16 следует, что четырёхкомпонентный суррогат SU4 является оптимальным суррогатом авиационного керосина ТС-1 – его физико-химические свойства хорошо согласуются со свойствами керосина ТС-1. Таким образом, SU4 является самым перспективным суррогатом для исследования характеристик горения КС авиационного ГТД.

Заключение по третьей главе

1. В результате работы сформирована методика расчёта свойств смесевых углеводородных топлив, в том числе керосина, включающая свойства, влияющие на распыл топлива, нагрев и испарение отдельных капель, а именно: плотность, вязкость, коэффициент поверхностного натяжения, теплоёмкость, теплопроводность, давление насыщенных паров, критические температура, плотность и давление.

2. Разработанная методика расчёта свойств валидирована как на собственных экспериментальных данных, так и на данных других авторов, что позволяет говорить об её адекватности.

3. Сформированы суррогаты авиационного керосина TC-1 – SU4, SU10 и SU11, удовлетворяющие требования как по приоритетным, так и по второстепенным свойствам: наименьшее среднее расхождение показал суррогат SU4. Эти суррогаты будут использованы для валидации новых методов расчёта характеристик испарения многокомпонентных капель.

4 РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ НАГРЕВА И ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ ТОПЛИВА МНОГОКОМПОНЕНТНОГО СОСТАВА

В главе 1, раздел 1.3 «Математические модели нагрева и испарения капель жидкого топлива» показано, что в современных программах CFD используются упрощённые модели нагрева и испарения капель жидкого топлива. Также из раздела 1.2 «Влияние различных параметров на характеристики испарения капель» следует, что на процессы нагрева и испарения капель значительное влияние оказывают такие параметры, как давление и температура газа вокруг капель, относительная скорость капли, поглощение излучения, и т.п., которыми пренебрегают при моделировании горения жидкого топлива в КС. В данной главе описывается модификация существующих моделей испарения капель топлива, позволяющая учесть такие параметры, как многокомпонентный состав капли, распределение температуры и концентрации компонентов внутри капли, насыщенность пара вокруг капель и их относительную скорость.

4.1 Разработка модели нагрева и испарения капель

Модель нагрева и испарения, разработанная в данной работе, основана на модели дискретных компонентов DCM[201], которая базируется на аналитическом решении уравнений теплопроводности (1.15) и диффузии компонентов (1.29) в одномерной постановке, представленных в разделе 1.3 «Математические модели нагрева и испарения капель жидкого топлива»:

$$T(R, T) = \frac{R_d}{R} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ q_n e^{-\kappa_R \lambda_n^2 t} - \frac{\sin \lambda_n}{\|v_n\|^2 \lambda_n^2} \mu_0(0) e^{-\kappa_R \lambda_n^2 t} - \frac{\sin \lambda_n}{\|v_n\|^2 \lambda_n^2} \int_0^t \frac{d\mu_0(\tau)}{d\tau} e^{-\kappa_R \lambda_n^2 (t-\tau)} d\tau \right\} \sin \left[\lambda_n \frac{R}{R_d} \right] + T_{eff}(t), \quad (1.15)$$

$$Y_{li} = \varepsilon_i + \frac{1}{R} \left\{ \exp \left[D_l \left(\frac{\lambda_0}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{Yi0} - Q_{Y0} \varepsilon_i] \sinh \left(\lambda_0 \frac{R}{R_d} \right) + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\exp \left[-D_l \left(\frac{\lambda_n}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{Yi0} - Q_{Y0} \varepsilon_i] \sin \left(\lambda_n \frac{R}{R_d} \right) \right] \right\}. \quad (1.29)$$

При этом для этой модели приняты следующие допущения:

- радиус капли остаётся постоянным, что допустимо для маленьких временных шагов (скорость регрессии на поверхности капли намного меньше скорости переноса в жидкости);

- капли изолированы и неподвижны.

Модель дискретных компонентов учитывает градиент температуры и концентрации компонентов внутри капли. Модель дискретных компонентов является для нас исходной. Эта модель была использована и верифицирована при моделировании микровзрыва каплей многокомпонентного состава в работах [93, 94]. В данной работы учтены еще два фактора: движение капли в пространстве и влияние испарения соседних капель, то есть влияние насыщенности пара вокруг капель.

Относительное движение капель учитывается с помощью модели эффективной теплопроводности и модели эффективной диффузии EDM, также представленных в разделе 1.3 «Математические модели нагрева и испарения капель жидкого топлива»: в случае движущихся капель вместо коэффициента теплопроводности в модели эффективной теплопроводности используется коэффициент эффективной теплопроводности (уравнение (1.8)), а в EDM вместо коэффициента диффузии используется коэффициент эффективной диффузии (уравнение (1.30)):

$$k_{eff} = \chi_T k_l; \quad (1.8)$$

$$\chi_Y = 1,86 + 0,86 \tanh[2,225 \log_{10}(Re_{d(l)} Sc_l / 30)]. \quad (1.30)$$

Насыщенность пара вокруг капли учитывается с помощью модели Стефана-Фукса[201]: ставится условие сохранения массового потока пара в любой точке вокруг неподвижной капли для каждого химического компонента. Для того, чтобы учитывать движение капель в модели Стефана-Фукса, применяют модель Абрамзона-Сиринаьяно[88] для каждого химического компонента: в случае движущихся капель, введены две толщины плёнки, формулы которых получены при условии, что перенос молекул за счёт теплопроводности или диффузии через плёнки должен равняться интенсивности конвективного теплообмена между поверхностью капли и внешним потоком. Эти условия учтены при определении числа Нуссельта и числа Шервуда (уравнения (1.21-1.22)):

$$\frac{2}{1 - \frac{Ra}{Ra + \delta_{T0}}} = Nu_0 \quad , \quad \frac{2}{1 - \frac{Ra}{Ra + \delta_{M0}}} = Sh_0 \quad ; \quad (1.21)$$

$$\delta_{T0} = \frac{2R_d}{Nu_0 - 2}, \quad \delta_{M0} = \frac{2R_d}{Sh_0 - 2}. \quad (1.22)$$

Разработанная модель нагрева и испарения позволяет рассчитывать изменение диаметра капли и температуры на поверхности и в центре капли в зависимости от времени. Данный метод был реализован в виде кода, написанного на языке программирования C++. Алгоритм расчёта реализован в нескольких этапах:

1. Первоначально предполагается, что распределение температуры и массовых долей компонентов внутри капли однородно, и приняты начальные молярные доли компонентов (таблица с исходными данными суррогатов). Для последующих временных шагов используются распределения, полученные на предыдущем временном шаге.

2. Расчёт парциальных давлений компонентов на поверхности капли с помощью закона Рауля (уравнение (4.1)):

$$x_{\text{пар},i} = \frac{p(T)_{\text{пар},i}}{p_{\text{сум}}} x_{\text{жид},i}. \quad (4.1)$$

3. Расчёт скорости испарения компонентов с помощью уравнения (1.26)[201]:

$$\dot{m}_i = -4\pi\varepsilon_i R_d D_v \rho_{\text{сум}} \ln(1 + B_M). \quad (1.26)$$

4. Определение нормальных условий смеси газа – пара.

5. Расчёт свойств смеси (вязкость, плотность, бинарный коэффициент диффузии, теплопроводность, теплоёмкость) с использованием базы данных Cantera[182].

6. Расчёт свойств газа (плотность, вязкость, теплопроводность) с использованием базы данных Cantera[182].

7. Расчёт теплоёмкости пара топлива с использованием базы данных Cantera[182].

8. Расчёт свойств жидкости, таких как плотность, вязкость, теплоёмкость, теплопроводность и бинарный коэффициент диффузии, проводится с использованием выражений (3.4), (3.9), (3.19) и (3.21) соответственно, взятых из

раздела 3.1 «Выбор и обоснование методов расчёта физико-химических свойств многокомпонентных углеводородных топлив и их суррогатов».

9. Расчёт безразмерных коэффициентов, общей скорости испарения и вклада каждого компонента.

10. Расчёт эффективной температуры, и параметров κ и ζ [198].

11. Расчёт распределения температуры внутри капли по аналитическому решению уравнения теплопроводности (1.15). Корни уравнения теплопроводности находятся методом деления пополам[228].

12. Расчёт средней температуры капли по методу Симпсона[228].

13. Расчёт распределения компонентов внутри капли на основе аналитического решения уравнений диффузии компонентов (1.29). Корни уравнения диффузии компонентов находятся методом бисекции[228].

14. Расчёт среднего состава капель по методу Симпсона[228].

15. Обновление плотности жидкости на основе изменений средней температуры и среднего состава капель.

16. Обновление диаметра капли, используя схему Рунге–Кутты 4-го порядка [228]и учитывая её испарение и термическое набухание.

17. Возвращение к шагу 1 и повторение всех шагов для следующего временного шага.

По результатам вычислений, программа выдает график зависимости относительного диаметра капли от времени, а также график зависимости изменения средней температуры, температуры на поверхности капли и температуры в центре капли от времени.

4.2 Расчёт кривой дистилляции

Одной из основных характеристик испарения любого топлива является его кривая дистилляции. Достоверный расчёт кривой дистилляции необходим для определения скорости испарения отдельных компонентов и характеристик горения отдельных фракций. Расчёт кривой дистилляции в данной работе представляет собой итерационный процесс. На первой итерации известны начальные массовые, молярные и объёмные доли, то есть объём жидкости

составляет $V = 100\%$. Для начального объёма жидкости находится температура появления первого пузырька (bubblepoint) с помощью уравнения Рауля и непосредственно определяется масса испарённого топлива для первой итерации [160]:

$$\chi_{\text{пар},i} = \frac{p(T)_{\text{пар},i}}{p_{\text{сум}}} \chi_{\text{жид},i} \quad , \quad (4.1)$$

где $\chi_{\text{пар},i}$ – молярные доли пара i -ого компонента;

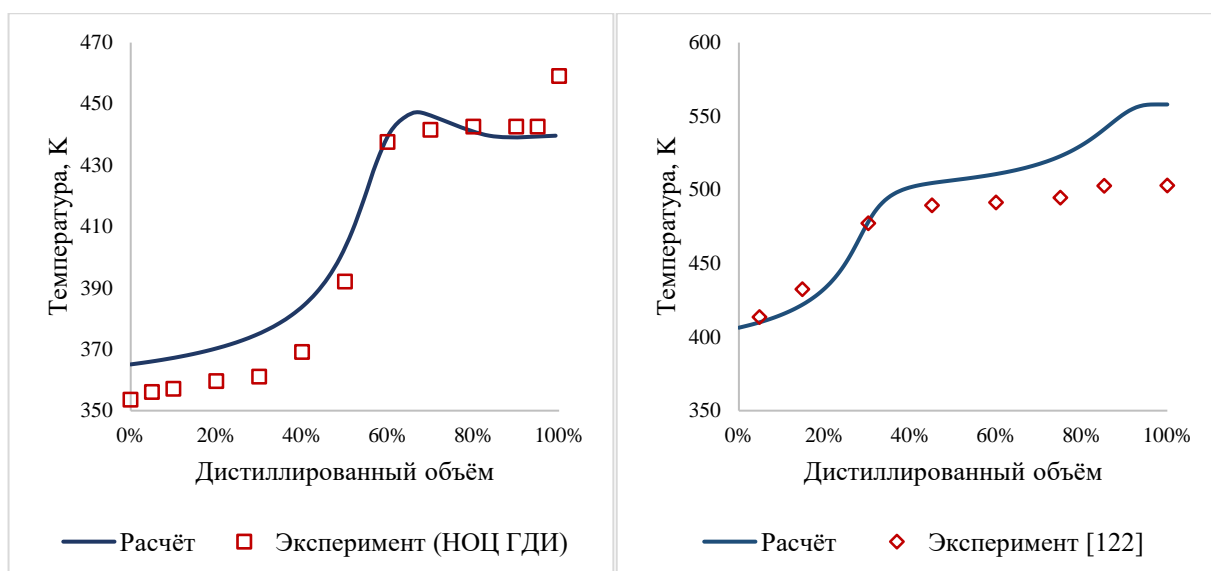
$\chi_{\text{жид},i}$ – молярные доли i -ого компонента в жидком состоянии;

$p(T)_{\text{пар},i}$ – давление насыщенны паров i -ого компонента при заданной температуре T , Па;

$p_{\text{сум}}$ – суммарное давления насыщенных паров смеси.

Исходя из начального объёма топлива и массы испарённого топлива определяется остаточный объём топлива после первой итерации, а далее рассчитываются новые массовые, молярные и объёмные доли по уравнениям (3.1)–(3.3), которые являются исходными данными для следующей итерации. Этот процесс повторяется до тех пор, пока остаточный объём топлива не станет равен нулю.

На рисунке 4.1 в качестве примера валидации расчётной методики представлены кривые дистилляции двух суррогатов авиационного керосина ТС-1: смеси бензола с деканом в пропорции 50%:50% по объёму и суррогат UM1 из работы [122]. Расхождение с экспериментальными данными не превышает 10%. Следует отметить, что с увеличением числа компонентов в смеси данное расхождение увеличивается. Это связано с неточным определением давления насыщенных паров компонентов, так как не для всех индивидуальных веществ имеются точные регрессионные зависимости. Также точность определения зависит от количества итераций: чем больше итераций, тем меньше погрешность. При валидации данного метода было принято количество итераций равное 75.



а)

б)

Рисунок 4.1 – Кривая дистилляции смесевых топлив

а) суррогат бензол/декан, б) суррогат UM1 [122]

4.3 Валидация модели нагрева и испарения многокомпонентных капель

Валидация разработанной модели проводилась для авиационного керосина марки ТС-1 и его суррогатов, состав которых представлен в таблице 4.1 в молярных долях. Суррогаты SU1 и SU2 учитывают только целевые характеристики горения. Суррогаты SU4, SU10 и SU11 разработаны по методике, предлагаемой в третьей главе данной работы. Результаты расчёта зависимости изменения диаметра капли от времени, а также зависимости изменения температур капли от времени для всех суррогатов представлены на рисунках 4.2–4.3.

Таблица 4.1 – Молярные составы исследуемых суррогатов керосина

CAS #	124-18-5	112-40-3	4390-04-9	108-87-2	1678-93-9	95-47-6	119-64-2	71-43-2
Формула	$C_{10}H_{22}$	$C_{12}H_{26}$	$C_{16}H_{34}$	C_7H_{14}	$C_{10}H_{20}$	C_8H_{10}	$C_{10}H_{12}$	C_6H_6
Название	декан	додекан	изоцетан	метилциклогексан	бутилциклогексан	о-ксилол	тетралин	бензол
SU1	0,271	0,154	0,09	0,275	-	0,146	0,064	-
SU2	0,174	0,298	-	-	0,242	-	-	0,286
SU4	0,499	-	0,129	0,153	-	-	0,219	-
SU10	0,391	-	-	0,436	-	0,173	-	-
SU11	0,226	-	-	0,425	0,231	-	-	0,118

При сравнении экспериментальных данных о времени и температуре испарения с расчётными данными, полученными с помощью разработанной модели, для керосина и его суррогатов получилось максимальное расхождение по времени испарения не больше 15%, а по температуре не больше 10%.

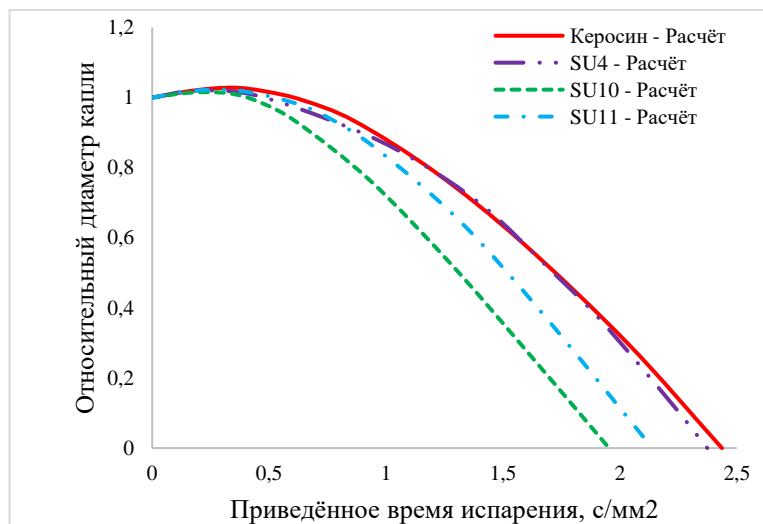


Рисунок 4.2 – Зависимость диаметра капли от приведённого времени для суррогатов керосина

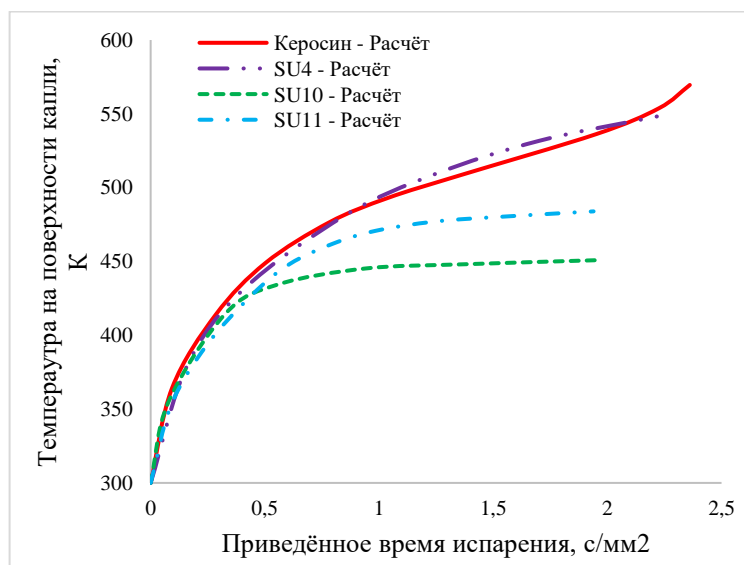


Рисунок 4.3 – Зависимость температуры на поверхности капли от приведённого времени для суррогатов керосина

4.4 Сравнение характеристик испарения керосина по разным моделям нагрева и испарения

На рисунке 4.4 представлено сравнение экспериментальных данных о времени и температуре испарения керосина марки ТС-1 с теоретическими данными, полученными с помощью разных моделей нагрева и испарения.

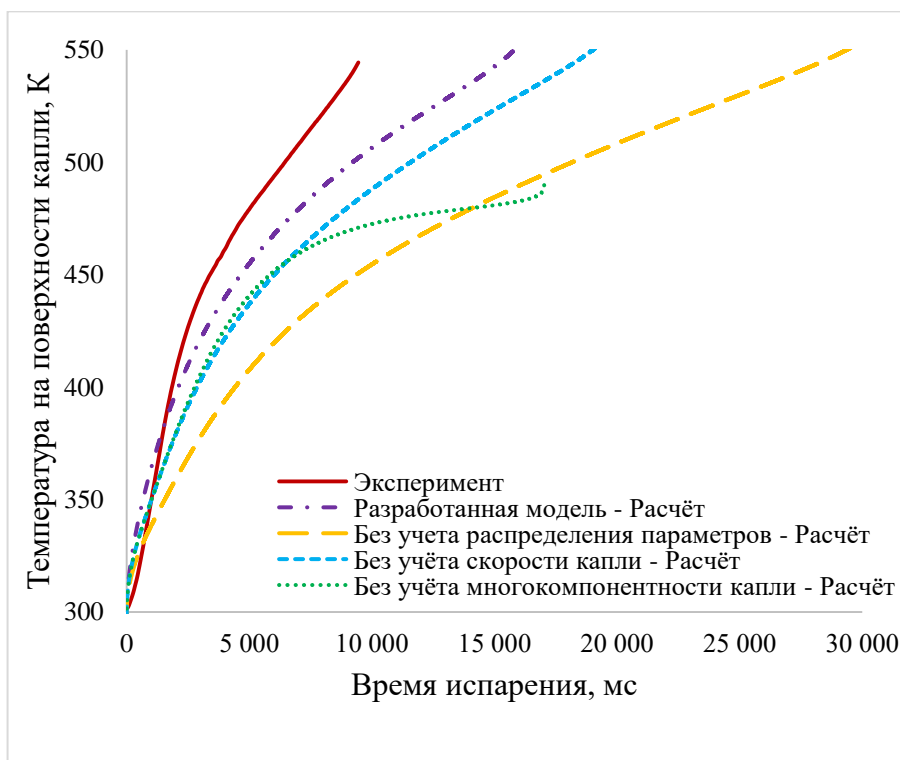


Рисунок 4.4 – Зависимости изменения температуры на поверхности капли от времени для керосина марки ТС-1 по разным моделям нагрева и испарения

Из рисунка 4.4 видно, что по разработанной модели точность определения времени и температуры испарения повышается на порядок по сравнению с другими моделями испарения. Так, например, если пренебрегать многокомпонентным составом капли, температура испарения получается ниже примерно на 100К, а время испарения дольше в три раза. Также видно, что есть факторы, которые в меньшей степени влияют на процесс нагрева и испарения капли. Например, температура испарения, полученная без учёта относительной скорости капли, ниже на 10-15К относительно разработанной модели испарения, а время испарения отличается на 15-20%. Видно, что разработанная в рамках данной работы модель нагрева и испарения обладает наименьшим расхождением среды всех моделей испарения.

4.5 Выбор суррогата для моделирования процессов горения в КС

Для выбора суррогата для моделирования рабочего процесса и для экспериментального исследования характеристик КС авиационного ГТД было проведено сравнение характеристик испарения суррогатов из таблицы 4.1. Характеристики испарения были получены в лаборатории тепломассопереноса Инженерной школы энергетики Томского политехнического университета с помощью муфельной трубчатой печи, как показано в разделе 2.2 «Экспериментальная установка для исследования характеристик нагрева и испарения многокомпонентных капель». Начальный диаметр капли во всех экспериментах составлял $0,89 \pm 0,05$ мм. Начальная температура капли контролировалась термопарой и поддерживалась на уровне 300 ± 5 К. Давление окружающей среды принималось равным 101325 Па, а температура газа контролировалась термопарой и поддерживалась на уровне 640 ± 10 К. Были исследованы три параметра: изменение температуры на поверхности капли по времени (рисунок 4.5), изменение диаметра капли по времени (рисунок 4.6) и кривая дистилляции (рисунок 4.7).

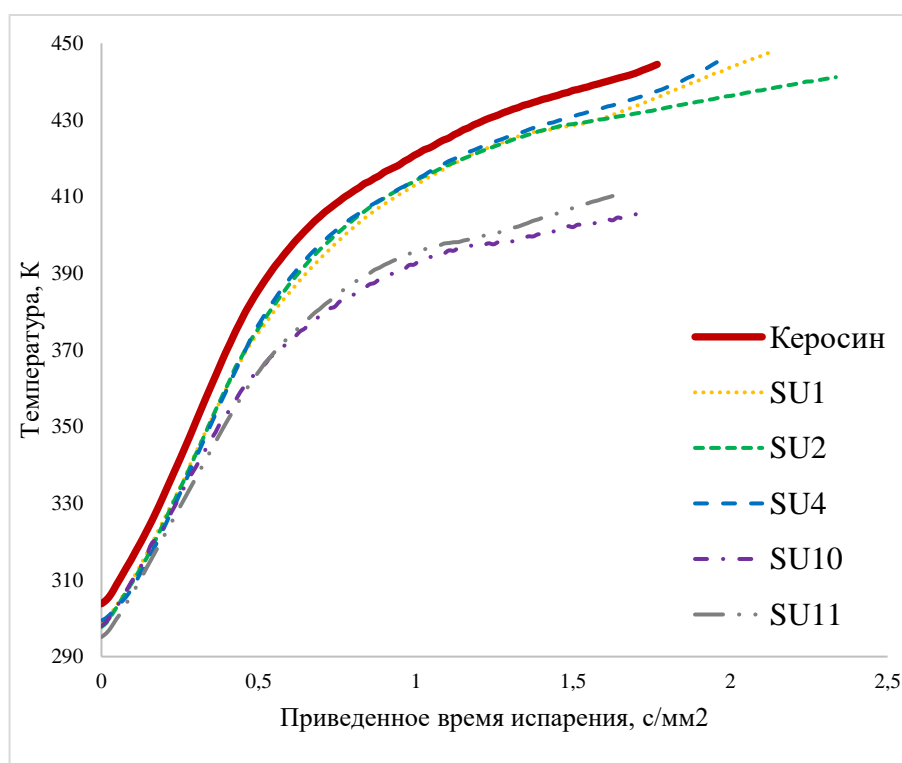


Рисунок 4.5 – Зависимость изменения температуры на поверхности капли от приведенного времени для керосина и его суррогатов

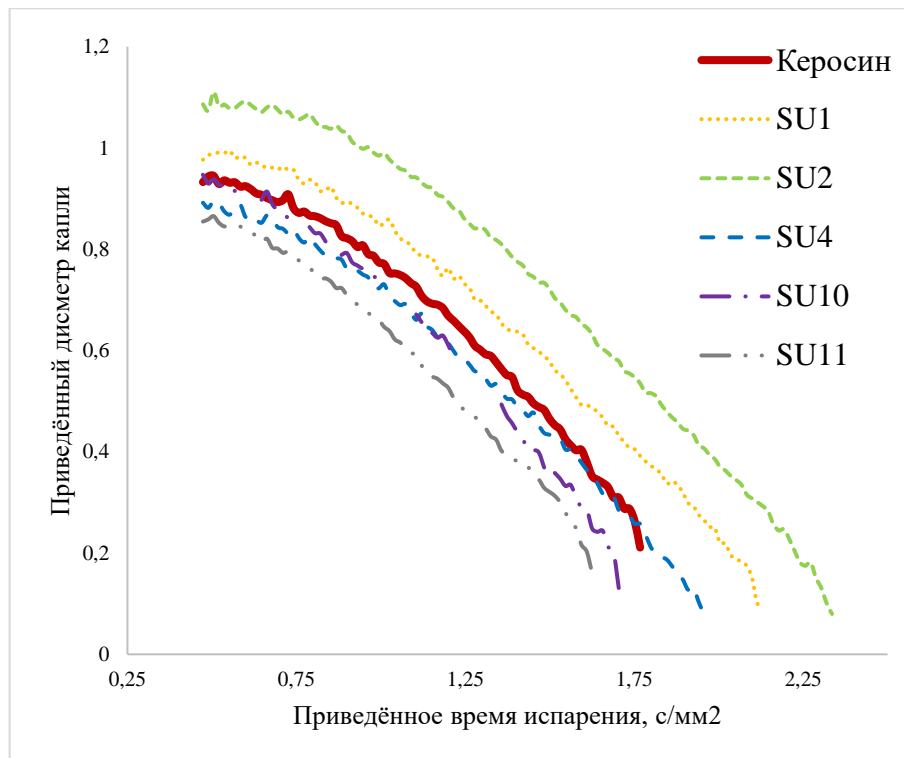
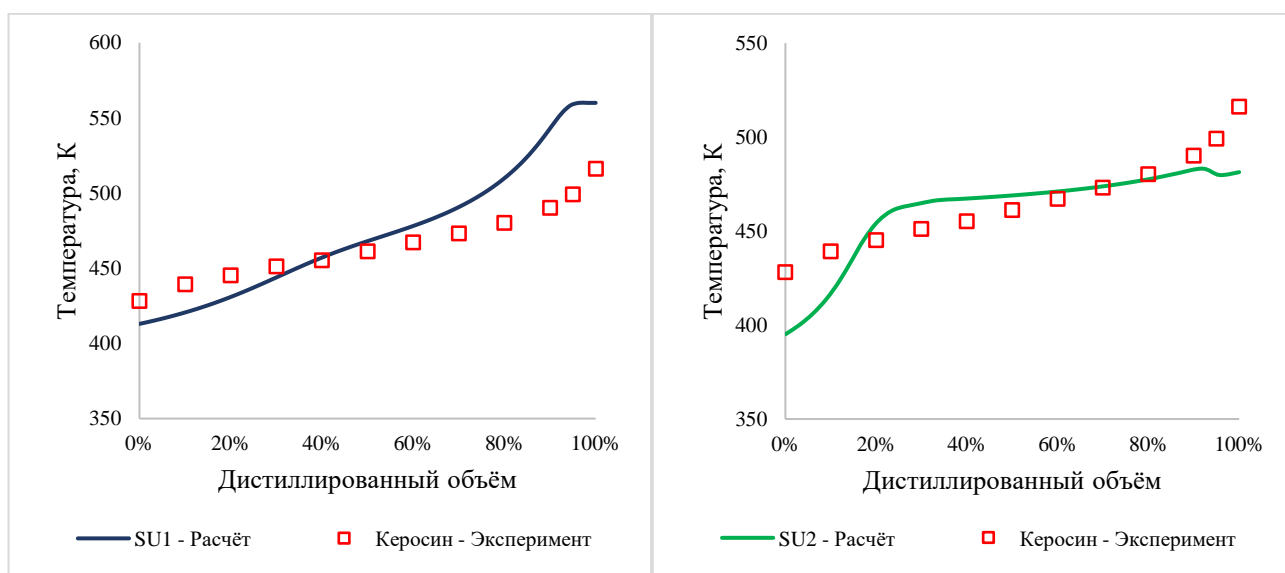


Рисунок 4.6 – Зависимость изменения относительного диаметра капли от приведённого времени для керосина и его суррогатов

Суррогаты SU1 испаряется медленнее керосина на 20,5%, а суррогат SU2 испаряется медленнее на 32,1%. Это объясняется тем, теплоёмкость у этих суррогатов больше теплоёмкости других суррогатов на 20-30%. При этом, температура испарения для этих суррогатов практически не отличается от температуры испарения керосина: температура испарения SU1 и SU2 выше температуры испарения керосина меньше чем на 1%. С другой стороны, суррогат SU10 испаряется быстрее керосина на 3,6%, а суррогат SU11 – быстрее на 8,1%. Такое поведение характеристик испарения для этих суррогатов ожидаемо, так как они состоят из более легких углеводородов. По этой же причине эти суррогаты испаряются при более низкой температуре: температура испарения SU10 меньше температуры испарения керосина на 8,8%, а температура испарения SU11 на 7,68% ниже температуры испарения керосина. Суррогат SU4 показал наилучшие характеристики испарения: его температура испарения выше температуры испарения керосина всего на 0,12%, при этом время испарения выше времени испарения керосина на 8,93%.

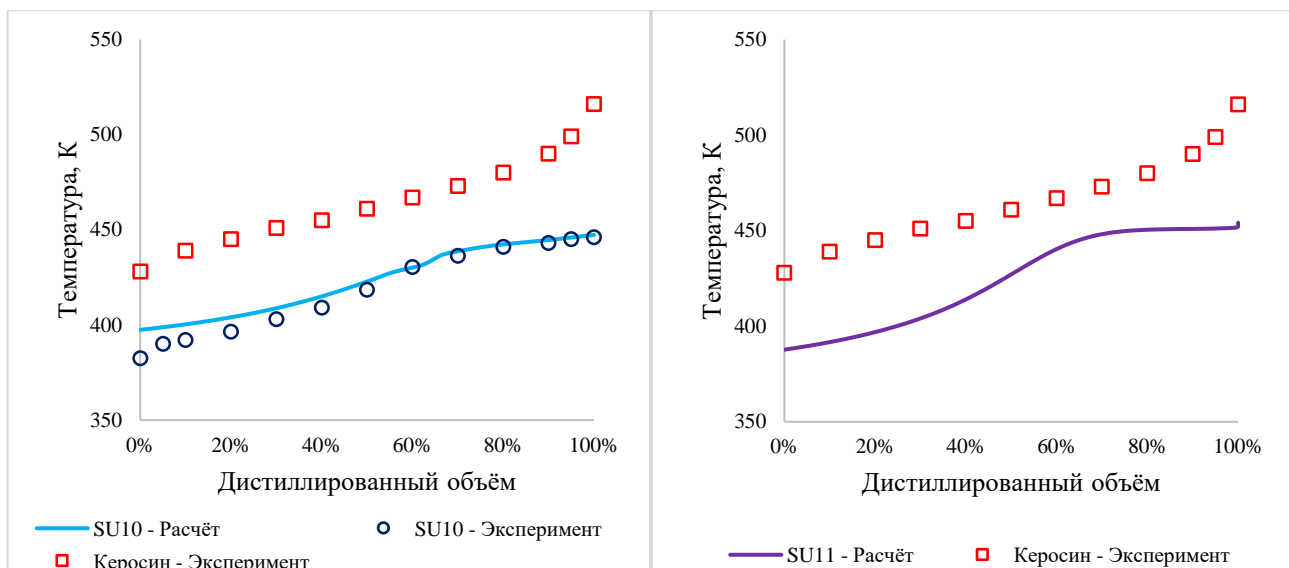
Изменение диаметра капли подобно изменению температуры испарения: диаметр капли суррогатов SU1 и SU2 при нагреве выше диаметра капли керосина из-за присутствия в них более тяжелые углеводороды, а диаметр капли суррогатов SU10 и SU11 при нагреве ниже керосина из-за присутствия более лёгких углеводородов. Лучшие показатели по изменению диаметра капли показал суррогат SU4, что свидетельствует о схожем химическом составе суррогата составу керосина.

На рисунке 4.7 представлены расчётная и экспериментальная кривая дистилляции суррогатов SU1, SU2, SU4, SU10 и SU11 и её сравнение с экспериментальной кривой дистилляции для керосина марки ТС-1. Следует отметить, что для суррогатов SU1, SU2 и SU11 не было проведено экспериментальное определение кривой дистилляции. Тем не менее валидация расчётной методики определения кривой дистилляции из раздела 3.1 «Выбор и обоснование методов расчёта физико-химических свойств многокомпонентных углеводородных топлив и их суррогатов», подраздела «Расчёт кривой дистилляции) была проведена для других смесей с максимальным средним расхождением равным 10%, что говорит о достоверности методики.



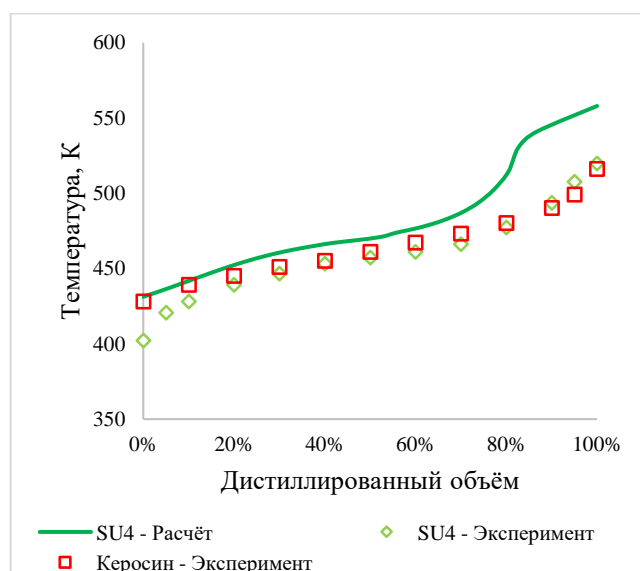
а)

б)



В)

Г)



Д)

Рисунок 4.7 – Сравнение теоретической и экспериментальной кривых дистилляции многокомпонентных суррогатов керосина с экспериментальной кривой дистилляции авиационного керосина марки ТС-1: а) суррогат SU1; б) суррогат SU2; в) суррогат SU10; г) суррогат SU11; д) суррогат SU4

Среднее расхождение по кривой дистилляции максимально для суррогатов SU10 и SU11 – 9,06% и 8,64%, соответственно. Расхождение для SU1 составляет 5,55%, а для SU4 3,98%. Минимальное расхождение получилось у суррогата SU2 – 2,43%. Из рисунка 4.7 видно, что после испарения 80% объёма расхождение между расчётом и экспериментом растёт для всех суррогатов, что свидетельствует

о большом расхождении при определении давления насыщенных паров при высоких температурах. Несмотря на то, что среднее расхождение у SU2 меньше, чем у SU4, именно суррогат SU4 качественно лучше всех имитирует кривую дистилляции керосина ТС-1.

Исходя из анализа расчётно-экспериментальных данных рисунков 4.5-4.7 суррогат SU4 выбран для численного моделирования рабочего процесса в КС авиационного ГТД.

Заключение по четвертой главе

В результате выполненной работы были достигнуты следующий результаты:

1. Отработана методика расчёта кривой дистилляции как одной из основных характеристик испарения топлива.

2. Разработана новая модель нагрева и испарения капель многокомпонентных топлив, учитывающая распределение температуры и концентрации компонентов внутри капли, относительную скорость капли и насыщенность пара вокруг капли. Данная методика валидирована с экспериментальными данными суррогатов SU1, SU2, SU4, SU10 и SU11.

3. Выбран четырёхкомпонентный суррогат SU4 для численного моделирования рабочего процесса в КС авиационного ГТД, который обладает наилучшими характеристиками испарения.

5 ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОЧЕГО ПРОЦЕССА В КАМЕРЕ СГОРАНИЯ АВИАЦИОННОГО ГТД С ПОМОЩЬЮ УСОВЕРШЕНСТВОВАННОГО МЕТОДА РАСЧЁТА ПРОЦЕССОВ НАГРЕВА И ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ

Как было показано во введении, при моделировании рабочего процесса в КС авиационных ГТД используются весьма упрощённые модели процессов нагрева и испарения капель, которые зачастую пренебрегают такими факторами, как многокомпонентный состав капли, распределение параметров внутри капли, насыщенность пара вокруг капли и относительная скорость движения капли. В рамках данной диссертационной работы моделирование рабочего процесса КС авиационного ГТД будет осуществляться с помощью усовершенствованного метода моделирования процессов нагрева и испарения капель жидкого топлива, который состоит из двух элементов. Первый – многокомпонентный суррогат керосина, учитывающий свойства, влияющие на процессы нагрева и испарения капель, такие как теплоёмкость, теплопроводность, давление насыщенных паров и кривая дистилляции (см. главу 3 «Формирование суррогата авиационного керосина для моделирования рабочего процесса камер сгорания ГТД с учётом нагрева и испарения капель»). Второй – модель нагрева и испарения капель многокомпонентного состава, учитывающая многокомпонентный состав капли, распределение температуры и концентрации компонентов внутри капли, насыщенность пара вокруг капли и относительную скорость капли (см. главу 4 «Разработка модели нагрева и испарения капель топлива многокомпонентного состава»). Каждый элемент рассмотрен по отдельности в главах 3 и 4 данной диссертационной работы. Далее рассматривается моделирование рабочего процесса в КС авиационного малоразмерного ГТД.

5.1 Математическая модель для моделирования процессов горения испарённого жидкого топлива в КС

Горение жидкого топлива в КС авиационного ГТД можно рассматривать как горение заранее частично подготовленной смеси [233, 234]. При данной схеме горения топливо и окислитель перемешиваются на молекулярном уровне до воспламенения, а горение происходит при распространении фронта пламени в

сторону несгоревших реагентов. Поэтому для моделирования горения керосина и его суррогатов в данной работе будет использована модель горения сгенерированного многообразия пламён FGM (FlameletGeneratedManifold)[183], которая реализована в пакете ANSYSFluent.

Модель турбулентного горения заранее частично подготовленной смеси

Модель FGM предполагает, что термическое состояние в турбулентном пламени подобно состоянию в ламинарном пламени, и это состояние может быть описано двумя параметрами: восстановленная доля смеси f (mixturefraction) и переменная завершённости реакции c (reactionprogress).

Модель заранее частично подготовленной смеси решает уравнение переноса для дисперсии переменной завершённости реакции c'^2 , согласно которому перед пламенем переменная завершённости реакции $c = 0$ (топливо и окислитель перемешиваются, нет горения), а за пламенем $c = 1$ (ТВС горит). Переменная завершённости реакции определяется как приведенная сумма массовых долей продуктов сгорания:

$$c = \frac{\sum_k \alpha_k (Y_k - Y_k^u)}{\sum_k \alpha_k (Y_k^{eq} - Y_k^u)} = \frac{Y_c}{Y_c^{eq}}, \quad (5.1)$$

где верхний индекс u – несгоревший реагент на входе в пламя;

Y_k – массовая доля k -го компонента;

верхний индекс eq – химическое равновесие.

α_k – константы, которые обычно равны нулю для реагентов и единице для нескольких продуктов сгорания.

Коэффициент α_k следует задавать так, чтобы скорость переменной завершённости реакции монотонно возрастала по пламени. По умолчанию в ANSYSFluent $\alpha_k = 0$ для всех компонентов, которые выбраны для сжигания углеводородов, кроме $\alpha_{CO_2} = \alpha_{CO} = 1$.

Уравнения одномерного адиабатического пламени предварительно подготовленной смеси преобразуются из физического пространства в пространство переменной завершённости реакции. Пренебрегая дифференциальной диффузией, эти уравнения имеют вид:

$$\rho \frac{\delta Y_k}{\delta t} + \frac{\delta Y_k}{\delta c} \dot{\omega}_c = \rho \chi_c \frac{\delta^2 Y_k}{\delta c^2} + \dot{\omega}_k; \quad (5.2)$$

$$\rho \frac{\delta T}{\delta t} + \frac{\delta T}{\delta c} \dot{\omega}_c = \rho \chi_c \frac{\delta^2 T}{\delta c^2} - \frac{1}{C_p} \sum_k h_k \dot{\omega}_c + \frac{\rho \chi_c}{C_p} \left(\frac{\delta C_p}{\delta c} + \sum_k C_{p,k} \frac{\delta Y_k}{\delta c} \right) \frac{\delta T}{\delta c}. \quad (5.3)$$

где Y_k – массовая доля k-го компонента;

T – температура;

ρ – плотность жидкости;

t – время;

$\dot{\omega}_k$ — суммарная скорость формирования k-го компонента;

h_k – суммарная энтальпия;

$C_{p,k}$ — удельная теплоёмкость k-ого компонента при постоянном давлении;

χ_c – скорость диссипации скаляра переменной завершённости реакций c .

Скорость диссипации скаляра χ_c в уравнениях (5.2-5.3) определяется как:

$$\chi_c = \frac{\lambda}{\rho C_p} |\nabla c|^2, \quad (5.4)$$

где λ – теплопроводность.

Следует отметить, что $\chi_c(c)$ обычно неизвестна и моделируется как:

$$\chi_c(c) = \chi_{max} \exp\left(-2(\operatorname{erfc}^{-1}(2c))^2\right), \quad (5.5)$$

где χ_{max} – заданная пользователем максимальная диссипация скаляра пламени заранее подготовленной смеси;

erfc^{-1} – обратная дополнительная функция ошибки.

Для горения частично подготовленной смеси многообразия перемешанных ламинарных пламен должны образовываться в широком диапазоне долей смеси. Многообразия заранее перемешанных пламен с различными долями смеси имеют различную максимальную диссипацию скаляра χ_{max} . В Ansys Fluent диссипация скаляра $\chi_c(f, c)$ для любой долей смеси f моделируется как:

$$\chi_c(f, c) = \chi_{max}^{sto} \exp\left(-2\left(\operatorname{erfc}^{-1}\left(\frac{f}{f_{sto}}\right)\right)^2\right) \exp\left(-2(\operatorname{erfc}^{-1}(2c))^2\right), \quad (5.6)$$

где sto – обозначение стехиометрической доли смеси.

Следовательно, единственным входным параметром модели для заранее перемешанного пламени, генерируемого в AnsysFluent, является диссипация скаляра при стехиометрической доли смеси χ_{max}^{sto} . Значение χ_{max}^{sto} по умолчанию равно 1000 (1/с), что разумно соответствует моделированию деформированных (свободно распространяющихся) многообразий пламён в физическом пространстве для насыщенных, обеднённых и стехиометрических углеводородных и водородных пламён при стандартной температуре и давлении.

Модель распыла, нагрева и испарения жидкого топлива

Моделирование распыла, нагрева и испарения производится в пакете ANSYS Fluent с помощью модели дискретных фаз DPM (Discrete Phase Model). Модель DPM основана на подходе Эйлера–Лагранжа, при котором жидкая фаза рассматривается как сплошная среда, путём решения уравнений Навье–Стокса, а уравнения дисперсной фазы решаются путем отслеживания большого количества частиц, пузырьков или капель через поле потока. Дисперсная фаза может обмениваться импульсом, массой и энергией с жидкой фазой. Этот подход значительно упрощается, когда игнорируется взаимодействие между частицами, а это требует, чтобы дисперсная вторая фаза занимала низкую объемную долю. Фундаментальное допущение модели заключается в том, что дискретная фаза занимает собой малую долю всего объёма, даже если она имеет высокую массовую нагрузку. Траектории частиц или капель рассчитываются индивидуально через определенные промежутки времени при расчёте жидкой фазы. Это делает модель подходящей для моделирования распылительных сушилок, горения угля и жидкого топлива, а также некоторых потоков, содержащих частицы.

В рамках данной работы используется тип распыла «Hollowcone», который позволит моделировать распыл каждого компонента топлива по отдельности [39, 41, 144-146]. Для данного типа распыла в качестве исходных данных необходимо задать радиус сопла форсунки, абсолютную скорость жидкой плёнки на выходе из сопла, максимальный диаметр капель, средний диаметр капель по Саутеру, угол распыливания и коэффициент закрутки SF , который равен отношению окружной

скорости к абсолютной. Максимальный размер капель равняется толщине жидкой плёнки согласно теории вязкости [44], а распределение капель по первичной зоне горения определяется функцией распределения Розина-Раммлера [165] через параметр распределения q по формуле:

$$f(d) = \frac{qd^{q-1}}{D^q} e\left(-\frac{d^q}{D}\right), \quad (5.7)$$

где d – средний диаметр капель по Саутеру, мкм;

D – максимальный диаметр капель, мкм;

q – параметр распределения.

Разработанная модель нагрева и испарения из главы 4 была внедрена в пакет ANSYS Fluent с помощью пользовательской функции UDF. Пользовательская функция – это функция, написанная на языке программирования C или C++, которую можно динамически загружать с помощью решателя Ansys Fluent для расширения его стандартных функций. Данная функция добавляется в модель дисперсной фазы DPM. Кроме того, в настройках модели дисперсной фазы изменяется количество скаляров на 116, что соответствует количеству слагаемых в рядах для определения температуры и диаметра капли [84].

Модель сети химических реакторов

Модель сети химических реакторов используется для моделирования полей распределения компонентов и температур в КС с использованием подробного химического кинетического механизма. Сеть химических реакторов строится на основе сходящегося решения в ANSYSFluent, смоделированного с помощью моделизированной подготовленной смеси. Полный химический механизм в формате CHEMKIN можно импортировать в Fluent и решить в сети реакторов. Объём КС автоматически разделяется на небольшое количество соединённых друг с другом реакторов идеального перемешивания. Массовые потоки через сеть определяются из решения CFD, а компоненты и температуры в сети определяются вместе. Таким образом, модель сети химических реакторов используется для моделирования химии с конечной скоростью и подробными кинетическими

механизмами, в частности выбросов загрязняющих веществ, таких как NO_x, CO и несгоревших углеводородов. Поскольку указанное количество реакторов с перемешиванием намного меньше, чем количество ячеек CFD, модель реакторной сети позволяет гораздо быстрее моделировать распределение компонентов и температуры, чем решать подробные химические процессы в каждой ячейке. Обычно модель сети химических реакторов выполняется на основе сходящегося стационарного решения RANS или усредненного по времени нестационарного решения.

Первый шаг в моделировании сети химических реакторов включает в себя объединение ячеек CFD в указанное количество реакторов. Поскольку каждый реактор представляет собой идеально перемешанное представление области КС, ячейки с приблизительно одинаковым составом группируются вместе. Для оптимальной производительности ячейки CFD, сгруппированные в каждом реакторе, имеют как можно более схожие температуры и массовые доли компонентов. После того как ячейки были сгруппированы, Fluent разбивает несмежные группы, а затем объединяет кластеры с наименьшим количеством ячеек с их ближайшими соседями до тех пор, пока не будет получено указанное количество реакторов.

Второй этап моделирования сети химических реакторов включает в себя решение реакторной сети. Матрица массового расхода \dot{m} рассчитывается на основе расходов ячеек в решении CFD, где каждый компонент матрицы \dot{m}_{ij} представляет собой массовый расход от реактора i к реактору j . Массовая доля k -ого компонента в реакторе определяется алгебраическим уравнением:

$$\sum_{j=1, j \neq i}^{N_{reactor}} \dot{m}_{ij} Y_k^j - \dot{m}_i Y_k^i = V_i \dot{\omega}_k^i + S_k^i, \quad (5.9)$$

где V_i – объём i -ого реактора;

$\dot{\omega}_k^i$ – скорость реакции k -ого компонента в i -ом реакторе;

S_k^i – источниковое слагаемое массы;

\dot{m}_i – суммарный массовый расход в i -том реакторе.

Уравнение энергии в сети химических реакторов не решается. Вместо этого по умолчанию температура в каждом реакторе рассчитывается по уравнению состояния. Давление в реакторе фиксировано и определяется как среднемассовое давление ячеек CFD в реакторе. При этом плотность каждого реактора фиксирована, поскольку как объем реактора, так и масса реактора постоянны. Такой подход гарантирует, что тепловые потери (или прирост) при CFD-моделировании будут надлежащим образом учтены в сети химических реакторов. Fluent также предоставляет возможность не рассчитывать температуру, и в этом случае температура фиксируется как среднемассовая температура ячеек CFD в реакторе. Ранее исследования показывали, что количество реакторов, при которых погрешность минимальная по сравнению с экспериментальными данными, составляет 800 [41]. Проведём расчёт при данном количестве реакторов.

5.2 Определение эмиссионных характеристик в камере сгорания авиационного малоразмерного ГТД

Геометрическая модель

Расчёт проводим для камеры сгорания авиационного малоразмерного ГТД МД-120. Геометрическая модель КС представлена на рисунке 5.1, которая была построена в системе автоматического проектирования SpaceClaim [55]. Камера сгорания кольцевая с равномерно расположенными в фронтальной плите восемью вихревыми горелочными устройствами с центробежными распылителями жидкого топлива предназначена для оснащения малоразмерного турбореактивного двигателя (ТРД).

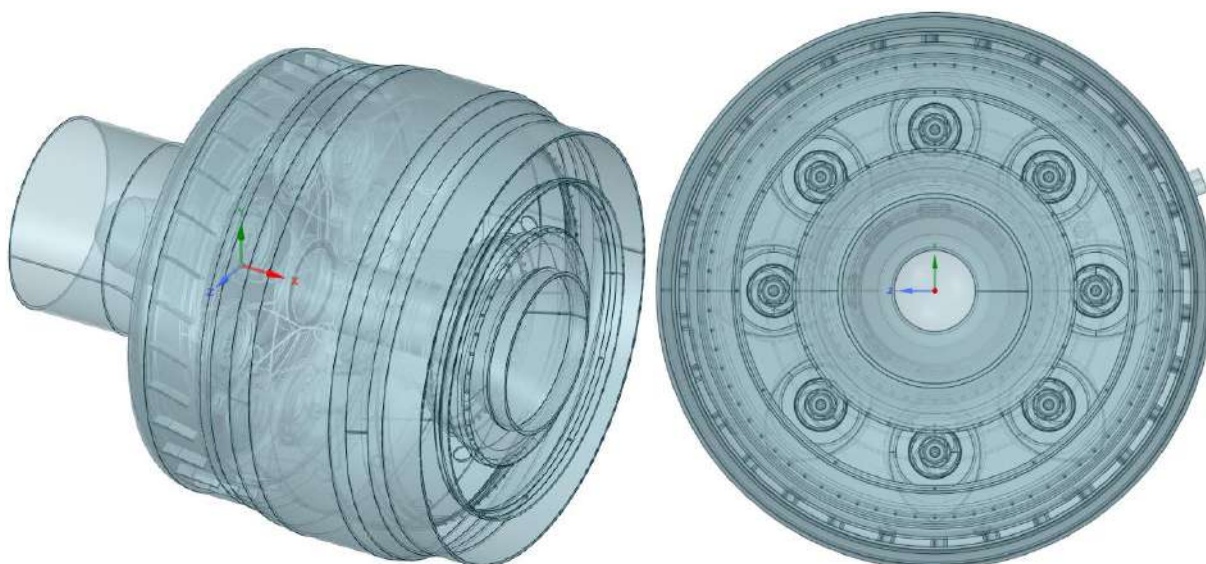


Рисунок 5.1 – Трёхмерная модель камеры сгорания авиационного малоразмерного ГТД

Сеточная модель

Конечно-элементная модель КС представлена на рисунке 5.2. Сеточная модель была построена в пакете ANSYS Fluent Meshing 2021R2 и состоит из полиэдров (в зоне пограничного слоя) и гексаэдров (объём КС). Данная комбинация типов конечных элементов позволяет повысить точность результатов расчёта при минимальном количестве элементов[92].

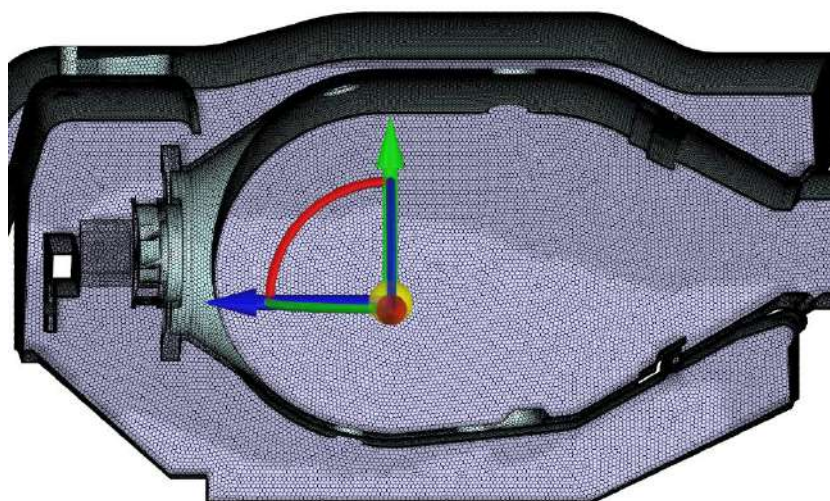


Рисунок 5.2 – Сеточная модель камеры сгорания авиационного ГТД

Граничные условия

Моделирование процессов горения в КС проводилось на четырёх режимах её работы, отличающихся между собой коэффициентом избытка воздуха $\alpha = 3; 4; 5; 6$. Температура на входе в камеру сгорания $T_k = 423\text{K}$ и расход воздуха $G_B = 340,56$ г/с остаются неизменными между режимами. Численное моделирование горения проводилось в пакете ANSYSFluent 2021R2. Исходные данные для расчётов процессов горения испарённого жидкого топлива представлены в таблице 5.1.

Таблица 5.1– Параметры режимов работы камеры сгорания

№ режима	Температура воздуха на входе в КС T_k^* , К	Избыточное давление на входе в КС p_k , Па	Расход топлива, G_T , г/с	Расход воздуха, G_B , г/с	Коэффициент избытка воздуха, α
1	423	5760	3,84	340,56	6
2			4,61		5
3			5,76		4
4			7,68		3

При моделировании процесса горения в КС в качестве топлива использовался четырехкомпонентный суррогат керосина SU4, разработанный в рамках данной диссертации. Физико-химические свойства суррогата SU4 представлены в таблице 3.14 (см. третью главу) а состав SU4 представлен в таблице 5.2.

Таблица 5.2 – Состав суррогата керосина SU4

CAS No.	124-18-5	4390-04-9	119-64-2	108-87-2
Формула	$C_{10}H_{22}$	$C_{16}H_{34}$	$C_{10}H_{12}$	C_7H_{14}
Название	декан	изоцетан	тетралин	метилциклогексан
SU4	52,7%	20,60%	16,20%	10,50%

Кинетическая схема окисления углеводородов моделируется с помощью механизма «POLIMI_PRF_PAH_RFUELS_LT_1412», которые включает в себя 352 компонента и 13264 промежуточных химических реакции.

Расход по компонентам суррогата керосина определяются по отношению к их концентрации в суррогате [58, 169, 203]. Сначала расход топлива определяется в зависимости от коэффициента избытка воздуха по формуле (2.2) (см. вторую главу):

$$\alpha = \frac{G_B}{G_T l_0},$$

где G_B – расход воздуха, г/с;

G_T – расход топлива, г/с;

l_0 – стехиометрический коэффициент топлива.

Полученный общий расход топлива умножается на массовую концентрацию каждого компонента, и получается расход каждого компонента в суррогате. В таблице 5.3 введён массовый расход каждого компонента для каждого режима.

Таблица 5.3 – Расход топлива по компонентам

Режим	α	$G_T, \text{г/с}$	$G_i, \text{г/с}$			
			$\text{C}_{10}\text{H}_{22}$	$\text{C}_{16}\text{H}_{34}$	$\text{C}_{10}\text{H}_{12}$	C_7H_{14}
1	3	7,68	3,78	1,55	3,78	0,79
2	4	5,76	2,83	1,16	2,83	0,59
3	5	4,61	2,27	0,93	2,27	0,47
4	6	3,84	1,89	0,77	0,76	0,39

Для использования разработанной модели нагрева и испарения капель в общую численную схему в ANSYSFluent была подготовлена пользовательская функция в виде подпрограммы на языке программирования C++ (рисунок 5.3), и включена в модели дискретной фазы.


```

#include "uof.h"
#include <time.h>

#define BM_MAX 1.E20
#define BM_MIN -0.99999
#define ACCURACY 1.e-6
#define PI 3.1415926535897932384626433832795
#define N_Lambda 44 // количество ячеек в ряду
#define N_INT 100 // количество слоев внутри капли
#define Delta_R 0.01 // = 1/N_INT

// 116 DPM_USER_REALS необходимо включить в ANSYS Fluent, если используется 100 слоев внутри капли
#define NCOMPONENTS 1 // Количество химических компонентов, если проверка в механизме
// необходима по количеству компонентов
#define VAP_END (116)

// BEGIN VAP functions
int lambda(real h_0, real lambda[])
{
    FILE * fout;
    int i;
    double lambda_left, lambda_right, f_left, f_right, lambda_mid, f_mid;
    double conv_crit = 1.e-8;
    double step = 1.e-7;

    for (i = 0; i < N_Lambda; i++) lambda[i] = -1.0;

    for (i = 0; i < N_Lambda; i++)
    {
        lambda_left = ((double)(i))*PI + step;
        lambda_right = (((double)(i + 1)) - 0.5)*PI - step;

        if (h_0 > 0.0)
        {
            lambda_left += 0.5*PI;
            lambda_right += PI*0.5;
        }

        f_left = lambda_left*cos(lambda_left) + h_0*sin(lambda_left);
        f_right = lambda_right*cos(lambda_right) + h_0*sin(lambda_right);
        if (f_left*f_right < 0.0)
        {
            while (lambda_right - lambda_left > conv_crit)
            {
                lambda_mid = (lambda_left + lambda_right)*0.5;
                f_mid = lambda_mid*cos(lambda_mid) + h_0*sin(lambda_mid);
            }
        }
    }
}

```

Рисунок 5.3 – Подготовка пользовательской функции для внедрения разработанной модели нагрева и испарения капель

Сходимость расчёта отслеживается по трём параметрам: расход воздуха, температура и концентрация топлива на выходе из КС. По этим параметрам создаются в ANSYS Fluent так называемые «Reports», которые во время расчёта показывают изменение осреднённых по массе параметров потока на выбранных плоскостях.

Результаты расчёта

На рисунке 5.4 представлено распределение температуры в продольном сечении КС. Максимальная температура наблюдается на режиме при $\alpha = 3$ – средняя температура на выходе составляет 1162К; минимальная температура составляет 777К и наблюдается на режиме при $\alpha = 6$. На рисунке 5.4а видно, что температура в первичной зоне горения при $\alpha = 3$ намного меньше, чем при $\alpha = 6$ (рисунок 5.4г). Это говорит о том, что при низких коэффициентах избытка воздуха (при больших расходах топлива) топливо с воздухом плохо перемешивается и не создаются благоприятные условия для горения ТВС. На рисунке 5.5 представлено распределение массовых долей CO в продольном сечении КС. На рисунке 5.5а видна большая концентрация CO в первичной зоне горения, что связано с неполным сгоранием топлива, что является подтверждением плохих условий перемешивания топлива с воздухом.

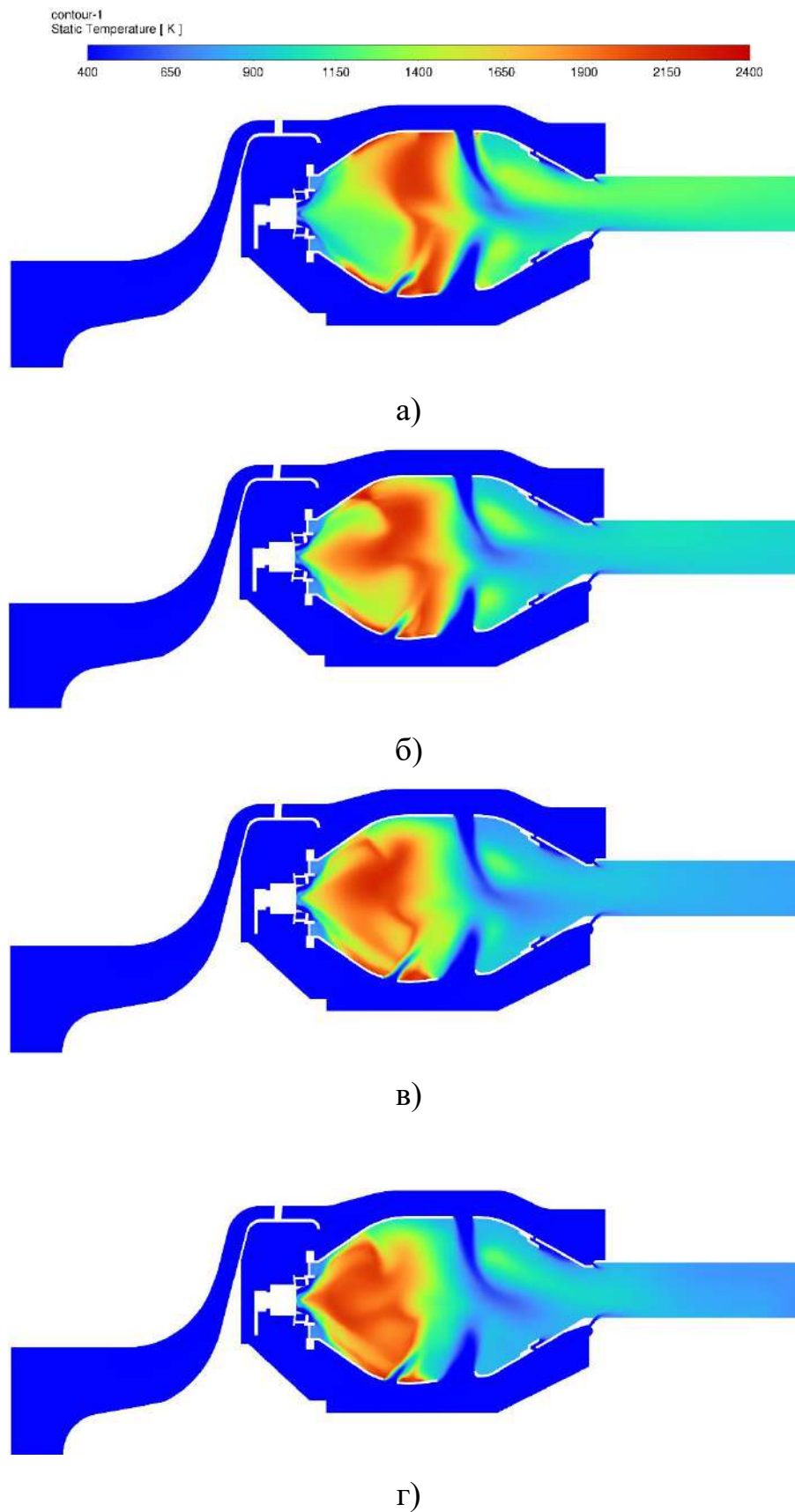


Рисунок 5.4 – Распределение температуры в продольном сечении КС:

а) $\alpha = 3$; б) $\alpha = 4$; в) $\alpha = 5$; г) $\alpha = 6$

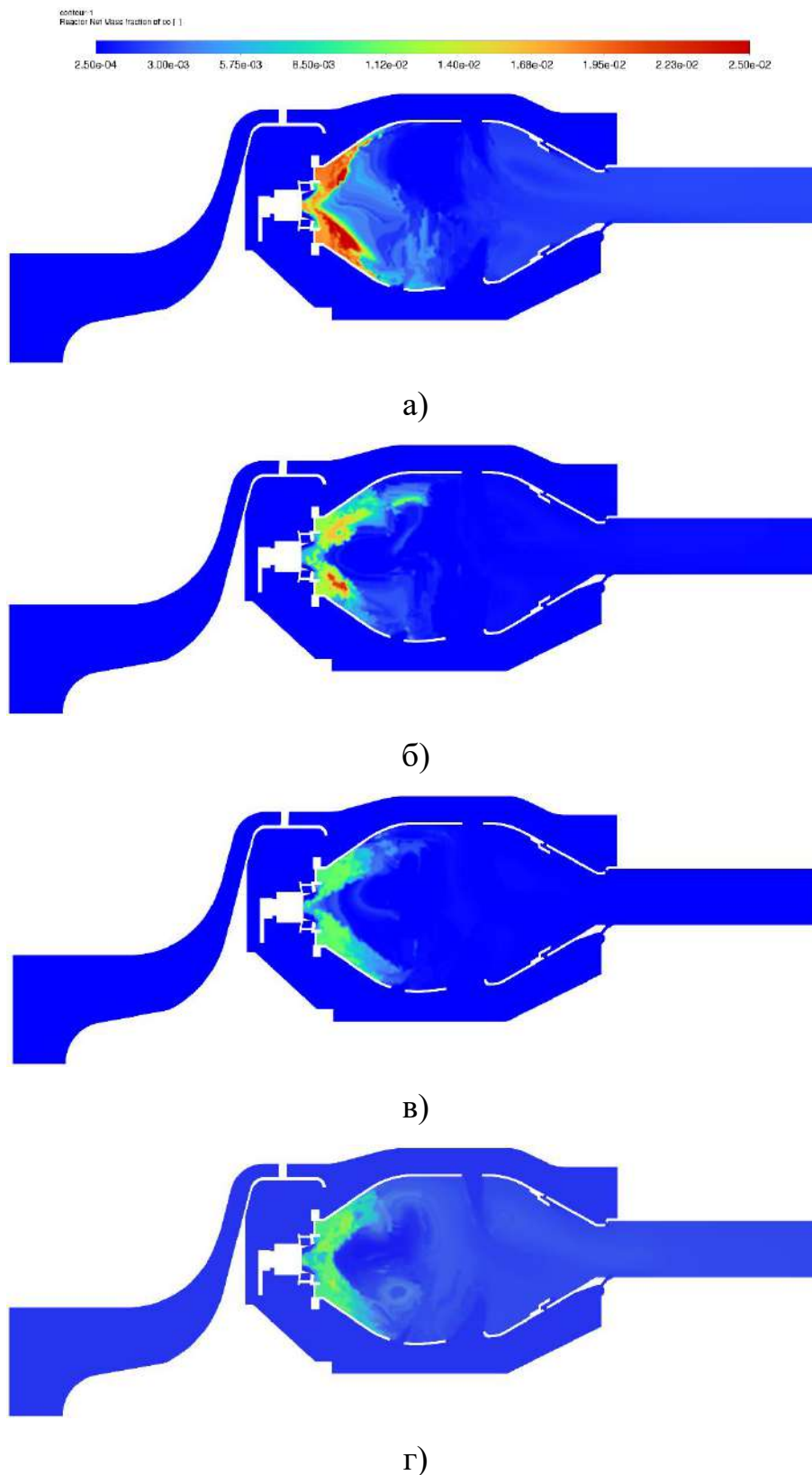


Рисунок 5.5 – Распределение CO в продольном сечении КС:

а) $\alpha = 3$; б) $\alpha = 4$; в) $\alpha = 5$; г) $\alpha = 6$

В таблице 5.4 представлены результаты обработки данных расчётов: средние по массе температура, концентрация CO и восстановленная доля топлива

f на выходе из КС. Восстановленная доля смеси f определяется по выражению (5.10) и представляет собой массовую долю компонентов, полученную из потока топлива:

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,окс}}{Z_{i,топ} - Z_{i,окс}}, \quad (5.10)$$

где Z_i – массовая доля i -го компонента. Нижний индекс «окс» обозначает значение на входе потока окислителя, а нижний индекс «топ» обозначает значение на входе потока топлива. Уровень эмиссии CO определяется по формуле (5.11):

$$EI_{CO} = \frac{y_{CO} * 1000}{f}, \quad (5.11)$$

где EI_{CO} – индекс эмиссии CO, г/кг топлива;

y_{CO} – среднемассовая доля CO на выходе из КС;

f – восстановленная доля топлива на выходе из КС.

Таблица 5.4 – Результаты трёхмерных расчётов

№ режима	Коэффициент избытка воздуха, α	Температура на выходе из КС, К	Массовая доля CO на выходе из КС	Восстановленная доля топлива
1	3	1162	0,004446	0,0219
2	4	965	0,002932	0,0166
3	5	839	0,002593	0,0124
4	6	777	0,002167	0,0102

Для оценки повышения эффективности определения характеристик КС с помощью нового метода расчёта процессов нагрева и испарения капель было проведено сравнение полученных в данной диссертации результатов с экспериментальными данными и с данными, полученными в классической модели нагрева и испарения капель, взятые из [54]. В таблицу 5.5 введены индексы эмиссии по CO полученные как экспериментально, так и численно, с использованием классической модели нагрева и испарения капель (модель по умолчанию в ANSYS Fluent) и с помощью разработанного метода расчёта процессов нагрева и испарения. На рисунке 5.6 Представлена зависимость

значений индексов эмиссии CO от коэффициента избытка воздуха на выходе из КС.

Таблица 5.5 – Индексы эмиссии CO на выходе из КС

№ режима	Коэффициент избытка воздуха, α	E_{CO} (эксперимент), г/кг топлива	E_{CO} (класс.), г/кг топлива	Δ , %	E_{CO} (нов.), г/кг топлива	Δ , %
1	3	170,76	202,41	18,5	194,66	14,2
2	4	125,59	176,12	40,2	151,97	21,1
3	5	110,29	208,30	88,8	156,61	42,3
4	6	112,55	210,89	87,3	157,58	39,8

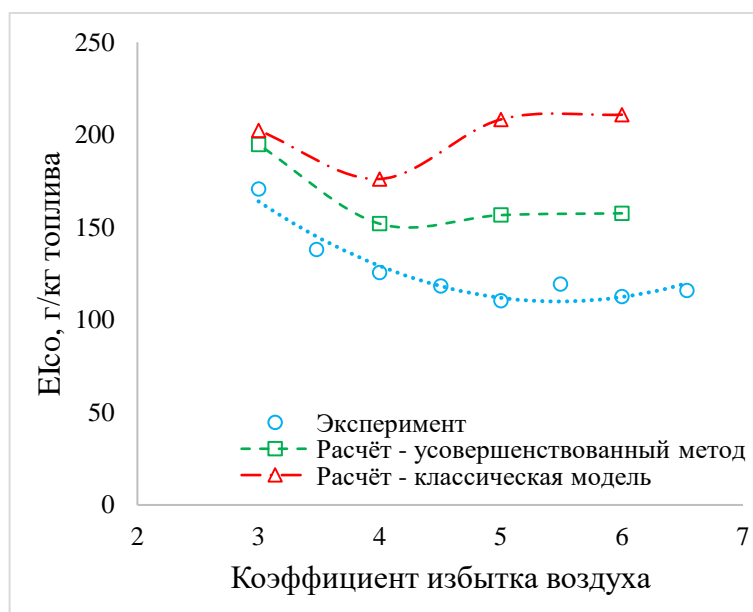


Рисунок 5.6 – Зависимость значений индексов эмиссии CO (E_{CO}) от коэффициента избытка воздуха (α) в выходном сечении модельной КС

Анализ расчётно-экспериментального исследования показывает, что погрешность численного определения индексов эмиссии оксида углерода (E_{CO}) с использованием разработанного метода снизилась с 20-90% до 20-40% во всем диапазоне режимов.

Заключения по пятой главе

1. Сформирован новый метод расчёта процессов нагрева и испарения капель, который включает в себя разработку нового четырёхкомпонентного

суррогата SU4 и разработанную модель нагрева и испарения капель, которая была использована в виде пользовательской функции в пакете ANSYS Fluent.

2. Проведено численное исследование характеристик горения для КС авиационного малоразмерного ГТД. Определены основные характеристики КС для четырёх режимов работы КС.

3. Проведено сравнение индексов эмиссии CO на выходе из КС, полученных с помощью классической модели нагрева и испарения, с индексами, полученными с помощью нового метода расчёта процессов нагрева и испарения, а также с индексами экспериментальных данных из литературы. Среднее расхождение индексов эмиссии CO снизилось на 20-40% во всём диапазоне режимов, что говорит о повышении эффективности использования нового метода.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенного исследования решена важная научная задача, направленная на повышение точности определения эмиссионных и эксплуатационных характеристики КС на этапе её проектирования и доводки, что обеспечит повышение эффективности проектирования камер сгорания авиационных ГТД. Получены и сформулированы следующие основные результаты:

1. Разработана методика формирования суррогатов авиационных топлив в виде зарегистрированной авторской программы для ЭВМ («FM Configurator V1»), отличающаяся от существующих учётом таких свойств, как теплоёмкость, теплопроводность и давление насыщенных паров, а также кривой дистилляции, позволяющая сформировать суррогаты для моделирования процессов нагрева и испарения капель.

2. Сформирован оригинальный четырёхкомпонентный состав суррогата авиационного керосина ТС-1, характеристики испарения которого соответствуют характеристикам испарения авиационного керосина: точность по времени испарения составляет 91%, по температуре на поверхности капли составляет 99%, а по кривой дистилляции – 96%.

3. Впервые получены экспериментальные данные о времени испарения и температуре на поверхности капель многокомпонентных жидких топлив (керосина и его суррогатов). Эти данные были использованы и могут быть использованы для валидации новых моделей нагрева и испарения капель многокомпонентного состава.

4. Разработан метод моделирования процессов нагрева и испарения капель жидкого топлива в трёхмерной постановке, отличающийся комплексным учётом многокомпонентности капель, концентраций компонентов внутри капли, насыщенности пара вокруг капли и относительной скорости движения капли, позволяющий уточнять время испарения капель, а также насыщенности пара вокруг них при численном моделировании рабочего процесса КС с помощью программ вычислительной газовой динамики.

5. Применение разработанного метода расчёта процессов нагрева и испарения капель многокомпонентного состава, а также сформированного для авиационного керосина марки ТС-1 суррогата SU4 позволило повысить точность определения эмиссионных характеристик ГТД. Расчётно-экспериментальное исследование по определению индекса эмиссии оксида углерода камерой сгорания малоразмерного ГТД показало, что погрешность определения этого параметра снизилась с 30 – 80% до 20% во всем диапазоне режимов.

Данная работа была выполнена в рамках гранта РФФИ «Разработка моделей нагрева и испарения капель суррогатов керосина» №21-19-00876, а ее результаты использованы для выполнения ряда хоздоговорных и госбюджетных НИР. Имеется акт использования результатов диссертационной работы на ПАО «ОДК-Кузнецов».

Перспектива дальнейшего развития темы состоит в совершенствовании модели нагрева и испарения капель для прогнозирования характеристик испарения в более широком диапазоне давлений и диаметров капель, что актуально для современных КС ГТД, а также оптимизации метода для более быстрых и точных вычислений.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Автоматический аппарат для определения фракционного состава нефти и нефтепродуктов АРН-ЛАБ-11 [Электронный ресурс]. – URL: https://loip.ru/upload/iblock/e1c/ARN_LAB_11_v.2019.pdf (дата обращения 01.01.2023).
2. Амадова, Б.К. Исследование свойств авиационного керосина [Текст] / Б.К. Амадова, М.В. Киргина // Проблемы геологии и освоения недр: труды XXII Международного симпозиума имени академика М.А. Усова студентов и молодых ученых, посвященного 155-летию со дня рождения академика В.А. Обручева, 135-летию со дня рождения академика М.А. Усова, основателей Сибирской горно-геологической школы, и 110-летию первого выпуска горных инженеров в Сибири, 2018. – Т. 2. – С. 371-372.
3. Антонов, Д.В. Микро-взрывная фрагментация двухжидкостных капель [Текст]: дис. на соискание ученой степени канд. физико-математических наук: 1.3.14.: защищена 06.04.2022 / Антонов Дмитрий Владимирович. – Томск, 2021. – 178 с.
4. Аппарат для определения максимальной высоты не коптящего пламени (ЛВП-М) [Электронный ресурс]. – URL: <https://nponha.ru/produkcziya/apparat-dlya-opredeleniya-maksimalnoy-vysoty-ne-koptyashchego-plameni-lvp-m> (дата обращения 01.01.2023).
5. АСТМ Д 1322-12. Метод определения высоты некоптящего пламени керосина и авиационного турбинного топлива [Электронный ресурс]. – URL: <https://files.stroyinf.ru/Data2/1/4293738/4293738709.pdf> (дата обращения: 01.01.2023).
6. Братков, А.А. Теоретические основы химмотологии [Текст] / Братков А.А. // Химия, 1985. – 320 с.
7. Варнатц, Ю. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ [Текст]

/ Ю. Варнатц, У. Маас, Р. Диббл; Под ред. П.А. Власова. Пер. с англ. Г.Л. Агафонова – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 352 с.

8. Волков, С.А. Анализ существующих и планируемых зарубежных требований к двигателям гражданской авиации по ограничению выбросов вредных веществ [Текст] / С.А. Волков, А.А. Горбатко // Экологические проблемы авиации; Под ред. Ю.Д. Халецкого. – М.: ТОРУС ПРЕСС, 2010. – 504 с.

9. Горбатко, А.А. Развитие системы международных ограничений вредных выбросов в атмосферу с выхлопными газами авиационных двигателей [Текст] / А.А. Горбатко, С.А. Волков // Экологические проблемы авиации. Под ред. Ю.Д. Халецкого. – М.: ТОРУС ПРЕСС, 2010. – 504 с.

10. ГОСТ 10227-2013. Топлива для реактивных двигателей. Технические условия [Текст]. – Введ. 2015-01-01. – М.: Издательство стандартов, 2014. – 34 с.

11. ГОСТ 11065-90. Топливо для реактивных двигателей. Расчётный метод определения низшей удельной теплоты сгорания [Текст]. – Введ. 1991-07-01. – М.: Издательство стандартов, 1990. – 7 с.

12. ГОСТ 13920-68. Нефтепродукты. Метод определения температуры самовоспламенения паров в воздухе [Текст]. – Введ. 1969-07-01. – М.: Издательство стандартов, 1968. – 21 с.

13. ГОСТ 1756–2002. Нефтепродукты. Определение давления насыщенных паров [Текст]. – Введ. 2000-06-22. – Минск: Межгосударственный совет по стандартизации, метрологии и сертификации, 2000. – 16 с.

14. ГОСТ 1756-2000. Нефтепродукты. Определение давления насыщенных паров [Текст]. – Введ. 2001-07-01. – М.: Издательство стандартов, 2000. – 15 с.

15. ГОСТ 17749-72. Топливо для реактивных двигателей. Спектрофотометрический метод определения содержания нафталиновых

углеводородов [Текст]. – Введ. 1974-01-01. – М.: Издательство стандартов, 1972. – 7 с.

16. ГОСТ 21261-91. Метод определения высшей теплоты сгорания и вычисление низшей теплоты сгорания [Текст]. – Введ. 1992-07-01. – М.: Издательство стандартов, 1991. – 24 с.

17. ГОСТ 2177-99. Нефтепродукты. Методы определения фракционного состава [Текст]. – Введ. 2001-01-01. – М.: Издательство стандартов, 1999. – 23 с.

18. ГОСТ 28781-90. Нефть и нефтепродукты. Метод определения давления насыщенных паров на аппарате с механическим диспергированием [Текст]. – Введ. 1991-07-01. – М.: Издательство стандартов, 1990. – 7 с.

19. ГОСТ 31872-2012. Нефтепродукты жидкие. Определение группового углеводородного состава методом флуоресцентной индикаторной адсорбции [Текст]. – Введ. 2014-01-01. – М.: Издательство стандартов, 2012. – 15 с.

20. ГОСТ 31874-2012. Нефть сырая и нефтепродукты. Определение давления насыщенных паров методом Рейда [Текст]. – Введ. 2014-07-01. – М.: Издательство стандартов, 2012. – 19 с.

21. ГОСТ 32402-2013. Топлива авиационные. Определение температуры кристаллизации автоматическим лазерным методом [Текст]. – Введ. 2015-01-01. – М.: Издательство стандартов, 2013. – 24 с.

22. ГОСТ 32508-2013. Топлива дизельные. Определение цетанового числа [Текст]. – Введ. 2013-11-05. – М.: Издательство стандартов, 2016. – 42 с.

23. ГОСТ 33157-2014. Нефтепродукты. Метод определения давления насыщенных паров (мини-метод) [Текст]. – Введ. 2016-07-01. – М.: Издательство стандартов, 2014. – 16 с.

24. ГОСТ 33-2000. Нефтепродукты. Прозрачные и непрозрачные жидкости. Определение кинематической вязкости и расчёт динамической

вязкости [Текст]. – Введ. 2002-01-01. – М.: Издательство стандартов, 2000. – 23 с.

25. ГОСТ 3900-85. Нефть и нефтепродукты. Методы определения плотности [Текст]. – Введ. 1987-01-01. – М.: Издательство стандартов, 1985.– 36 с.

26. ГОСТ 4333-2014. Нефтепродукты. Методы определения температур вспышки и воспламенения в открытом тигле [Текст]. – Введ. 2016-07-01. – М.: Издательство стандартов, 1990. – 21 с.

27. ГОСТ 4338-91. Топливо для авиационных газотурбинных двигателей. Определение высоты некопящего пламени [Текст]. – Введ. 1993-01-01. – М.: Издательство стандартов, 1991. – 11 с.

28. ГОСТ 5066-91. Топлива моторные. Методы определения температуры помутнения, начала кристаллизации и кристаллизации [Текст].– Введ. 1993-01-01. – М.: Издательство стандартов, 1991. – 8 с.

29. ГОСТ 6994-74. Нефтепродукты светлые. Метод определения ароматических углеводородов [Текст]. – Введ. 1976-01-01. – М.: Издательство стандартов, 1974. – 13 с.

30. ГОСТ EN 12916-2012. Нефтепродукты. Определение типов ароматических углеводородов в средних дистиллятах. Метод высокоэффективной жидкостной хроматографии с детектированием по коэффициенту рефракции [Текст]. – Введ. 2017-07-01. – М.: Издательство стандартов, 2012. – 26.

31. ГОСТ EN 15195-2014. Нефтепродукты жидкие средние дистиллятные топлива [Текст]. – Введ. 2017-01-01. – М.: Издательство стандартов, 2014. – 23 с.

32. ГОСТ ISO 3405-2013. Нефтепродукты. Определения фракционного состава при атмосферном давлении [Текст]. – Введ. 2015-01-01. – М.: Издательство стандартов, 2013. – 68 с.

33. ГОСТ Р 53707-2009. Нефтепродукты. Метод дистилляции при атмосферном давлении [Текст]. – Введ. 2009-12-15. – М.: Издательство стандартов, 2019. – 45 с.
34. ГОСТ Р 53708-2009. Нефтепродукты. Жидкости прозрачные и непрозрачные. Определение кинематической вязкости и расчёт динамической вязкости [Текст]. – Введ. 2011-01-01. – М.: Издательство стандартов, 2009. – 20 с.
35. ГОСТ Р 57037-2016. Нефтепродукты. Определение плотности, относительной плотности и плотности в градусах API цифровым плотнометром [Текст]. – Введ. 2016-09-05. – М.: Издательство стандартов, 2019. – 16 с.
36. ГОСТ Р 58440-2019. Топлива среднестиллятные. Определение производного цетанового числа с использованием камеры сгорания постоянного объема с непосредственным впрыском топлива [Текст]. – Введ. 2020-01-01. – М.: Издательство стандартов, 2019. – 16 с.
37. ГОСТ Р ЕН ИСО 3405-2007. Нефтепродукты. Метод определения фракционного состава при атмосферном давлении [Текст]. – Введ. 2007-12-27. – М.: Издательство стандартов, 2008. – 31 с.
38. Григорьев, А.В. Теория камеры сгорания [Текст] / А.В. Григорьев, В.А. Митрофанов, О.А. Рудаков, Н.Д. Саливон Под ред. О.А. Рудакова. – СПб.: Наука, 2010. – 228с.
39. Гураков Н.И. Расчёт характеристик течения жидкого топлива при его подаче через центробежные форсунки малоразмерных газотурбинных двигателей [Текст] / Н.И. Гураков, И.А. Зубрилин, М. Эрнандэс Моралес, Д.В. Якушкин, А.А. Диденко, С.Г. Матвеев, Ю.В. Комисар // Вестник Самарского университета. Аэрокосмическая техника, технологии и машиностроение, 2021. – Р. 19-35.
40. Гураков, Н.И. Гибридная методика определения среднего диаметра капель (D32) керосина в области течения за центробежной форсункой [Текст] / Н.И. Гураков, С.Г. Матвеев, И.А. Зубрилин, А.А.

Диденко, М. Эрнандэс Моралес, В.В. Ястребов // Проблемы и перспективы развития двигателестроения: материалы докладов международной научно-технической конференции, 2021. – Р. 146-147.

41. Гураков, Н.И. Гибридная методика определения характеристик распыла жидкого топлива центробежными форсунками камер сгорания авиационных ГТД [Текст]: дис. на соискание ученой степени канд. тех. наук: 05.07.05.: защищена / Гураков Никита Игорьевич. – Самара, 2021. – 157 с.

42. Данильченко, В.П. Проектирование авиационных газотурбинных двигателей [Текст] / В.П. Данильченко, С.В. Лукачев, Ю.Л. Ковылов [и др.]. – Самара: Изд-во СНЦ РАН, 2008. – 620 с.

43. Демин, А.В. Развитие методов численного моделирования процессов в камерах сгорания тепловых двигателей и энергоустановок [Текст]: дис. на соискание ученой степени доктора тех. наук: 05.07.05.: защищена 31.10.2002 / Демин Алексей Владимирович. – Казань, 2002. – 245 с.

44. Дитякин, Ю.Ф. Распыливание жидкостей [Текст] / Ю.Ф. Дитякин, Л.А. Клячко. – М.: Машиностроение, 1977. – 209 с.

45. Дубовкин, Н.Ф. Физико-химические и эксплуатационные свойства ракетных топлив [Текст] / Н.Ф. Дубовкин. – М.: Химия, 1985. – 240 с.

46. Иноземцев, А.А. Основы конструирования авиационных двигателей и энергетических установок [Текст]: Учебник для студентов специальности «Авиационные двигатели и энергетические установки». Серия: «Газотурбинные двигатели» / А.А. Иноземцев, М.А. Нихамкин, В.Л. Сандрацкий. – М.: Машиностроение, 2007. – 396 с.

47. Козлов А.Л. Перспективы развития авиационного двигателестроения [Текст] / А.Л. Козлов, В.А. Палкин // Авиационные двигатели, 2023. – V. 1, №. 18. – Р. 13-30.

48. Кузнецов, В.Р. Турбулентность и горение [Текст] / В.Р. Кузнецов, В.А. Сабельников– М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986. – 288 с.
49. Кулик, М.И. Прогрев и испарение капель жидкого топлива в потоке нагретого воздуха [Текст].
50. Куценко, Ю.Г. Методология проектирования малоэмиссионных камер сгорания газотурбинных двигателей на основе математических моделей физико-химических процессов [Текст]: дис. на соискание ученой степени доктора технических наук: 05.07.05: защищена 19.11.2010 / Куценко Юрий Геннадьевич. – Пермь, 2010. – 298 с.
51. Лаборатория тепломассопереноса, Томский политехнический университет [Электронный ресурс]. – URL: <https://tpu.ru/university/structure/department/view/?id=9081> (дата обращения: 01.01.2023).
52. Ланский, А.М. Рабочий процесс камер сгорания малоразмерных ГТД [Текст] / А.М. Ланский, С.В. Лукачѐв, С.Г. Матвеев. – Самара: Изд-во СНЦ РАН, 2009. – 334 с.
53. Лефевр, А. Процессы в камерах сгорания ГТД [Текст]: Пер. с англ./ А. Лефевр – М.: Мир, 1986. - 566 с.
54. Лукачев, С.В. Выброс канцерогенов при сжигании углеводородных топлив [Текст]: учеб. пособие / С.В. Лукачѐв, А.А Горбатко, С.Г Матвеев. – М: Машиностроение, 1999. – 153 с.
55. Матвеев С.Г. Создание трехмерных геометрических виртуальных моделей камер сгорания [Текст]: учеб. пособие / С.Г. Матвеев, С.В. Лукачев, М.Ю. Орлов, М.Ю. Анисимов, И.А. Зубрилин – Самара: Изд-во Самар. гос. аэрокосм. Ун-та, 2010. – с.
56. Матвеев, С.Г. Разработка компонентного состава суррогата авиационного керосина для моделирования рабочего процесса камеры сгорания газотурбинного двигателя / С.Г. Матвеев // Вестник Самарского

университета. Аэрокосмическая техника, технологии и машиностроение, 2019. – Т. 18, №. 1. – С. 78-87.

57. Матвеев, С.Г. Расчёт образования СО и NOX в камерах сгорания ГТД [Электронный ресурс] : электрон. учеб. пособие / С.Г. Матвеев, С.В. Лукачев, М.Ю. Орлов, И.В. Чечет, Ю.В. Красовская; Минобрнауки России, Самар. гос. аэрокосм. ун-т им. С. П. Королева (нац. исслед. ун-т). – Электрон. текстовые и граф. дан. (1,07 Мбайт). – Самара, 2012. – 1 эл. опт. диск (CD-ROM).

58. Матвеев, С.Г. Расчет характеристик струйных течений газовых сред в камерах сгорания ГТД [Текст]: учебное пособие / С.Г. Матвеев, М.Ю. Орлов, В.Ю. Абрашкин, М.Ю. Анисимов, Н.С. Макаров, С.С. Матвеев– Самара: Изд-во Самар. гос. аэрокосм. ун-та, 2011. – 108 с.

59. Матвеев, С.С. Методика определения эмиссии оксидов углерода камерами сгорания газотурбинных двигателей с использованием детальной химической кинетики окисления суррогатов керосина [Текст]: дис. на соискание ученой степени канд. тех. наук: 05.07.05.: защищена / Матвеев Сергей Сергеевич. – Самара, 2017. – 175 с.

60. Метод определения высоты некоптящего пламени керосина и авиационного турбинного топлива. ASTM Д 1322-12 [Электронный ресурс]. – URL: <https://files.stroyinf.ru/Data2/1/4293738/4293738709.pdf> (дата обращения: 01.11.2022).

61. Мустафин, Р.Р. Математическое моделирование процессов тепломассообмена двухфазных потоков в двигателях летательных аппаратов [Текст]: дис. на соискание ученой степени канд. тех. наук: 05.07.05.: защищена 18.02.2010 / Мустафин Ренат Рафаилович. – Уфа, 2010. – 150 с.

62. Описание типа средства измерений TEMPOS [Электронный ресурс]. – URL: <https://all-pribors.ru/docs/77568-20.pdf> (дата обращения: 01.01.2023).

63. Оран, Э. Численное моделирование реагирующих потоков [Текст]: Пер. с англ./ Э. Оран, Дж. Борис – М.: Мир, 1990.– 660 с.

64. Орлов, М.Ю. Моделирование процессов в камере сгорания [Текст]: учеб. пособие / М.Ю. Орлов, С.В. Лукачёв, С.Г. Матвеев. – Самара: Изд-во Самарского университета, 2017. – 292 с.

65. Охрана окружающей среды. Приложение 16 к Конвекции о международной гражданской авиации. Том II. Эмиссия авиационных двигателей. Издание пятое, июль 2023 года.

66. Пат. 182039 Российская Федерация. Пробоотборник с жидкостным охлаждением [Текст] / Н.С. Миронов, В.М. Анисимов, С.С. Матвеев, И.В. Чечет, В.Ю. Абрашкин, М.Ю. Анисимов, С.Г. Матвеев; заявитель и патентообладатель Самар. науч.-ислед. ун-т. – № 2018114194; заявл. 17.04.18; опубл. 01.08.18.

67. Пчелкин, Ю.М. Камеры сгорания газотурбинных двигателей [Текст]: учебник для студентов вузов, обучающихся по специальности «Турбиностроение» / Ю.М. Пчелкин – М.: Машиностроение, 1984. - 280 с.

68. Раушенбах, Б.В. Физические основы рабочего процесса в камерах сгорания воздушно реактивных двигателей [Текст] / Б.В. Раушенбах, С.А. Белый, И.В. Беспалов, В.Я. Бородачев, М.С. Волынский, А.Г. Прудников.– М.: Машиностроение, 1964. – 522с.

69. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ «FM Configurator V1» // И.А. Зубрилин, Я.А. Останюк, К.Д. Цапенков, М. Эрнандэс Моралес, А.Ю. Кузнецов, Д.В. Якушкин, В.В. Ястребов № 2023614390 от 01.03.2023.

70. Сметанюк, В.А. Моделирование испарения и горения капель в газовом потоке [Текст]: дис. на соискание ученой степени канд. физико-математических наук: 01.04.17.: защищена 22.06.2005 / Сметанюк Виктор Алексеевич. – Москва, 2005. – 120 с.

71. Создание научно-технического задела по расчётно-экспериментальному обоснованию выбора суррогата авиационного

керосина марки ТС-1 для моделирования рабочего процесса в камерах сгорания газотурбинных двигателей [Текст]: отчёт о НИР (заключ.) / Самарский университет; рук. С.Г. Матвеев; исполн. И.А. Зубрилин [и др.]. – Самара, 2020. – 131 с. – № ОДК/1974/11/2020/643.

72. Срезневский Б.Н. ЖРФХО, ч.– физ., Е.14, 1882. – С. 420.

73. Стандартная спецификация на топлива газотурбинных двигателей [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.astm.org/Standards/D1655.htm> (дата обращения: 01.09.2022).

74. Стандартный метод определения расчётного цетанового индекса по уравнению с четырьмя переменными. ASTM D 4737 [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.astm.org/Standards/D4737-RUS.htm> (дата обращения: 01.01.2023).

75. Старик, А.М. Эмиссия из авиационных двигателей и воздействие авиации на атмосферные процессы и климат [Текст] / А.М. Старик, О.Н. Фаворский // Экологические проблемы авиации; Под ред. Ю.Д. Халецкого. – М.: ТОРУС ПРЕСС, 2010. – 504 с.

76. Старцев, Н.И. Конструкция и проектирование камеры сгорания ГТД [Текст]: учеб. пособие / Н.И. Старцев // Самара: Изд-во Самар. гос. аэрокосм. ун-та, 2007. – 120 с.

77. Столяров, Е.А. Расчет физико-химических свойств жидкостей: справочник [Текст] / Е.А. Столяров, Н.Г. Орлова; Химия. Ленингр. отд-ние, 1976. – 273 с.

78. Стрижак, П.А. Тепломассоперенос при зажигании жидких конденсированных веществ и парогазовых смесей локальными источниками энергии [Текст]: диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук: 01.04.14.: защищена 21.11.2011 / Стрижак Павел Александрович. – Томск, 2011. – 393 с.

79. Формирование детального кинетического механизма окисления выбранных суррогатов керосина и их валидация на модельных пламёнах [Текст]: отчёт о НИР (промежуточн.) / Самарский университет; рук.

Е.А. Щепакина; исполн. С.Г. Матвеев [и др.]. – Самара, 2017. – 298 с. – № ГР АААА-А16-116111610210-7.

80. Хафизов, Ф.Ш. Давление насыщенных паров для нефти / Ф.Ш. Хафизов, А.В. Краснов // Электронный научный журнал «Нефтегазовое дело», 2012. – №. 3. – Р. 406-412.

81. Чечет, И.В. Методика определения эмиссии канцерогенных ароматических углеводородов камерами сгорания газотурбинных двигателей и установок [Текст]: диссертация на соискание степени канд. тех. наук: 05.07.05.: защищена 27.12.2018 / Чечет Иван Викторович. – Самара, 2018. – 149 с.

82. Эрнандэс Моралес, М. Исследование свойств фракций суррогатов авиационного керосина [Текст] / М. Эрнандэс Моралес, К.Д. Цапенков, И.А. Зубрилин, В.В. Ястребов, Д.В. Якушкин, А.Ю. Кузнецов // Сборник тезисов научно-технического конгресса по двигателестроению (НТКД-2022).- 2022. – Т. 2. – С. 371-372.

83. Эрнандэс Моралес, М. Методика расчета свойств суррогата авиационного керосина, влияющих на характеристики распыла и испарения [Текст] // М. Эрнандэс Моралес М., И.А. Зубрилин, С.Г. Матвеев, Н.И. Гураков, А.А. Диденко // Проблемы и перспективы развития двигателестроения: материалы докладов международной научно-технической конференции.- 2021. – Т. 2. – С. 154-155.

84. Эрнандэс Моралес, М. Методика расчета тепломассообмена углеводородных топлив с учетом их многокомпонентности, внутренней диффузии и насыщенности окружающего газа [Текст] / М. Эрнандэс Моралес, И.А. Зубрилин, С.Г. Матвеев, П.А. Стрижак, Д.В. Антонов // Сборник тезисов научно-технического конгресса по двигателестроению (НТКД-2022), 2022. – С. 182-183.

85. Эрнандэс Моралес, М. Применение суррогатов керосина для моделирования процессов горения [Текст] / И.А. Зубрилин, С.С. Матвеев, Д.В. Идрисов, М. Эрнандэс Моралес, С.Г. Матвеев // Сборник тезисов XI

Всероссийской научно-технической конференции с международным участием «Процессы горения, теплообмена и экология тепловых двигателей».- 2019. – Т.2. – С. 90-91.

86. A high-temperature chemical kinetic model of n-alkane (up to n-dodecane), cyclohexane, and methyl-, ethyl-, n-propyl and n-butyl-cyclohexane oxidation at high temperatures, JetSurF version 2.0, September 19, 2010 [Электронный ресурс]. – URL:

<http://web.stanford.edu/group/haiwanglab/JetSurF/JetSurF2.0/index.html>

(дата обращения: 01.01.2023).

87. Abramzon, B. Convective vaporization of fuel droplets with thermal radiation absorption [Текст] / B. Abramzon, S. Sazhin // Fuel, 2006. – V. 85. – P. 32–46.

88. Abramzon, B. Droplet vaporization model for spray combustion calculations [Текст] / B. Abramzon, W.A. Sirignano // Int. J. Heat Mass Transf., 1989. – V. 32. – P. 1605–1618.

89. Agosta, A. Reference components of jet fuels: kinetic modeling and experiments results [Text] / A. Agosta, D.L. Miller, N.P. Cernansky, T. Favarelli, E. Ranzi // Exp. Therm. Fluid Sci., 2004. – № 28. – P. 701-708.

90. Al Qubeissi, M.A. Modelling of biodiesel fuel droplet heating and evaporation: Effects of fuel composition [Текст] / M.A. Al Qubeissi, S.S.Sazhin, C. Crua, J. Turner, M.R. Heikal // Fuel, 2015. – V. 154. – P. 308–318.

91. Alsulamia, R. Investigating the role of atomization on flame stability of liquid fuels in an annular spray burner [Текст] / R. Alsulamia, B. Windella, S. Natesb, W. Wangb, S. H. Wonb, B. Windom // Fuel, 2020. – V. 265. – P. 116945.

92. ANSYS Fluent theory guide, ANSYS 2021R2.

93. Antonov, D.V. Explosive disintegration of two-component drops under intense conductive, convective, and radiant heating [Текст] / Dmitry V. Antonov, Maxim V. Piskunov, Pavel A. Strizhak // Applied Thermal Engineering, 2019. – V. 152. – P. 409-419.

94. Antonov, D.V. Micro-explosion and autoignition of composite fuel/water droplets [Текст] / Dmitrii V. Antonov, Genii V. Kuznetsov, Pavel A. Strizhak, Oyuna Rybdylova, Sergei S. Sazhin // *Combustion and Flame*, 2019. – V. 210. – P. 479-489.
95. ASTM D 4953-15 standard test method for vapor pressure of gasoline and gasoline-oxygenate blends (dry method) [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.astm.org/Standards/D4953.htm> (дата обращения: 01.01.2023).
96. ASTM D323 standard test method for vapor pressure of petroleum products (Reid method) [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.astm.org/Standards/D323.htm> (дата обращения: 01.01.2023).
97. ASTM D6890 standard test method for determination of ignition delay and derived cetane number (DCN) of diesel fuel oils by combustion in a constant volume chamber [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.astm.org/Standards/D6890> (дата обращения: 01.12.2022).
98. ASTM D86-23 Standard test method for distillation of petroleum products and liquid fuels at atmospheric pressure [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.astm.org/d0086-23.html> (дата обращения: 01.01.2023).
99. Basu, S. Droplets and sprays. Applications for combustion and propulsion [Текст] / Saptarshi Basu, Avinash Kumar Agarwal, Achintya Mukhopadhyay, Chetankumar Patel // Springer, 2018. – 433 с.
100. Bello, M.N. Surface engineered nanoparticles dispersed in kerosene: The effect of oleophobicity on droplet combustion [Текст] / M.N. Bello, K.J. Hill, M.L. Pantoya, R.J. Jouet, J.M. Horn // *Combustion and Flame*, 2018. – V. 188. – P. 243–249.
101. Birkhold, F. Modeling and simulation of the injection of urea-water-solution for automotive SCR DeNO_x-systems [Текст] / F. Birkhold, U. Meingast, P. Wassermann, O. Deutschmann // *Applied Catalysis B: Environmental*, 2007. – V. 70, №. 1. – P. 119-127.

102. Bohren, C.F. Absorption and scattering of light by small particles [Текст] / C.F. Bohren, D.R. Huffman // John Wiley & Sons, 1983. – 544 c.
103. Bonafai, I. Improvement of fuel oil spray combustion inside a 7 MW industrial furnace: a numerical study [Текст] / I. Bonafai, I. Wolf, P. Blecich // Appl. Therm. Eng., 2017. – V. 110. – P. 795–804.
104. Brereton, G.J. A discrete multicomponent temperature-dependent model for the evaporation of spherical droplets [Текст] / G.J. Brereton // Int. J. Heat Mass Transfer, 2013. – V. 60. – P. 512–22.
105. Bykov, V. Thermal explosion in a hot gas mixture with fuel droplets: A two reactants model [Текст] / V. Bykov, I. Goldfarb, V. Gol'dshtein, J.B. Greenberg // Combust. Theory Model. – V. 6. – P. 1–21.
106. Calcote, H.F. Effect of molecular structure on incipient soot formation [Текст] / H.F. Calcote // Combustion and Flame, 1983. – V. 49, №. 1–3. – P. 289-304.
107. Celtek, M.S. The impact of turbulence and combustion models on flames and emissions in a low swirl burner [Текст] / Mehmet Salih Celtek, Ali Pınarbaşı, Gokhan Coskun, Usame Demir // Fuel, 2023. – V. 343. – P. 127905.
108. Chiang, C.H. Numerical analysis of convecting, vaporizing fuel droplet with variable properties [Текст] / C.H. Chiang, M.S. Raju, W.A. Sirignano // Int. J. Heat Mass Transf., 1992. – V. 35. – P. 1307–1324.
109. Chin, J.S. Steady state evaporation characteristics of hydrocarbon fuel drops [Текст] / J.S. Chin, A.H. Lefebvre // AIAA, 1982. – V. 82. – P. 1176.
110. Colket, M. Overview of the national jet fuels combustion program [Текст] / M. Colket, J. Heyne, M. Rumizen, M. Gupta, T. Edwards, W. M. Roquemore, G. Andac, R. Boehm, J. Lovett, R. Williams, J. Condevaux, D. Turner, N. Rizk, J. Tishkoff, C. Li, J. Moder, D. Friend, V. Sankaran // AIAA Journal, 2017. – V. 55, №4. – P. 1087–1104.
111. Colket, M.B. Development of an experimental database and kinetic models for surrogate jet fuels [Text] / M.B. Colket, T. Edwards, S. Williams, N.P. Cernansky, D.L. Miller, F.N. Egolfopoulos, P. Lindstede, K. Seshadri, F.L.

Dryer, C.K. Law, D. Friend, D.B. Lenhart, H. Pitsch, A. Sarofim, M. Smooke, W. Tsang // AIAA, 2007. – № 770. – P. 1-25.

112. Collins, C. Implementing phytoremediation of petroleum hydrocarbons [Текст] / C. Collins // Methods in Biotechnology, 2007. – V. 23, №. 23. – P. 99–108.

113. Cooke, J.A. Computational and experimental study of JP-8, a surrogate, and its components in counterflow diffusion flames [Текст] / J.A. Cooke, M. Bellucci, M.D. Smooke, A. Gomez, A. Violi, T. Faravelli, E. Ranzi // Proc. Combust. Inst., 2005. – №. 30. – P. 439-446.

114. Cossali, G.E. Drop heating and evaporation: Analytical solutions in curvilinear coordinate systems [Текст] / Gianpietro Elvio Cossali, Simona Tonin // Springer, Mathematical engineering, 2021. – 399 c.

115. Dagaut, P. High pressure oxidation of normal decane and kerosene in dilute conditions from low to high temperature [Текст] / P. Dagaut, M. Reuillon, M. Cathonnet, D. Voisin // Phys. Chem. Bio, 1995. – V. 92. – P. 47-76.

116. Dagaut, P. Kerosene combustion at pressures up to 40 atm: experimental study and detailed chemical kinetic modeling [Text] / P. Dagaut, M. Reuillon, J.C. Boettner, M. Cathonnet // Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute. – 1994. – V. 25. – P. 919-926.

117. Dagaut, P. The combustion of kerosene: Experimental results and kinetic modelling using 1-to 3-component surrogate model fuels [Text] / P. Dagaut, A. El Bakali // Fuel, 2006. – V. 85, №. 7. – P. 944-956.

118. Danaila I. Vortex ring models [Текст] / Ionut Danaila, Felix Kaplanski, Sergei S. Sazhin. // Springer, Mathematical engineering, 2021. – 197 c.

119. Datta, A. Effects of spray characteristics on combustion performance of a liquid fuel spray in a gas turbine combustor [Текст] / A. Datta, S.K. Som // International Journal of Energy Research, 1999. – V. 40, №. 5. – P. 349.

120. Dean, A. J. Autoignition of surrogate fuels at elevated temperatures and pressures [Text] / A.J. Dean, O.G. Penyazkov, K.L. Sevruck, B. Varatharajan // Proceedings of the Combustion Institute, 2007. – Т. 31, №. 2. – С. 2481-2488.

121. Deprédurand, V. Heat and mass transfer in evaporating droplets in interaction: Influence of the fuel [Текст] / V. Deprédurand, G. Castanet, F. Lemoine // Int. J. Heat Mass Transfer, 2010. – V. 53. – P. 3495-33502.

122. Development of surrogates for aviation jet fuels [Электронный ресурс]. – URL: https://tspace.library.utoronto.ca/bitstream/1807/43267/3/Nasseri_Ali_201311_MASc_thesis.pdf (датаобращения: 01.01.2023).

123. Dombrovsky, L.A. Heating and evaporation of semi-transparent diesel fuel droplets in the presence of thermal radiation [Текст] / L.A. Dombrovsky, S.S. Sazhin, E.M. Sazhina, G. Feng, M.R. Heikal, M.E.A. Bardsley, S.V. Mikhalovsk // Fuel, 2001. – V. 80, №11. – P. 1535-1544.

124. Dooley, S. A jet fuel surrogate formulated by real fuel properties [Text] / S. Dooley, S.H. Won, M. Chaos, J. Heyne, Y. Ju, F.L. Dryer, K. Kumar, C. Sung, H. Wang, M.A. Oehlschlaeger, R.J. Santoro, T. A. Litzinger // Combust Flame, 2010. – V. 157, №. 12. – P. 2333-2339.

125. Dooley, S. The experimental evaluation of a methodology for surrogate fuel formulation to emulate gas phase combustion kinetic phenomena [Text] / S. Dooley, S.H. Won, J. Heyne, T.I. Farouk, Y. Ju, F.L. Dryer, K. Kumar, X. Hui, C.-J. Sung, H. Wang, M. A. Oehlschlaeger, V. Iyer, S. Iyer, T. A. Litzinger, R. J. Santoro, T. Malewicki, K. Brezinsky // Combust. Flame, 2012. – V. 159, №. 4. – P. 1444–1466.

126. Duong, L.H. Experimental investigation of the effects of cycloparaffins and aromatics on the sooting tendency and the freezing point of soap-derived biokerosene and normal paraffins [Текст] / Long H. Duong, Osamu Fujita, Iman K. Reksowardojo, Tatang H. Soerawidjaja, Godlief F. Neonufa // Fuel, 2016. – V. 185. – P. 855-862.

127. Eddings, E.G. Formulation of a surrogate for the simulation of Jet fuel pool fires [Text] / E.G. Eddings, S. Yan, W. Ciro, A.F. Sarofim // Combustion science and technology, 2005. – V. 177, №. 4. – P. 715-739.
128. Edwards, T. Surrogate Mixtures to represent complex aviation and rocket fuels [Text] / T. Edwards, L. Maurice // Journal of propulsion and Power, 2001. – V.17, №. 2. – P. 461-466.
129. Ekaab, N.S. Experimental study of the effect of fuel spray angle on emissions of pollutants from a continuous combustion process [Текст] / N.S. Ekaab // Journal of AI Rafidain University College, 2017. – V. 2017, №. 41. – P. 319-332.
130. Elwardany, A.E. A quasi-discrete model for droplet heating and evaporation: Application to Diesel and gasoline fuels [Текст] / A.E. Elwardany, S.S. Sazhin // Fuel, 2012. – V. 9. – P. 685–694.
131. Elwardany, A.E. Mono– and multi-component droplet cooling/heating and evaporation: Comparative analysis of numerical models [Текст] / A.E. Elwardany, I.G. Gusev, G. Castanet, F. Lemoine, S.S. Sazhin // Atomization and Sprays, 2011. – V. 21. – P. 907–931.
132. Fuchs, N.A. Evaporation and droplet growth in gaseous media [Текст] / N.A. Fuchs // Pergamon Press Ltd., 1959.
133. Ghandehariun, S. Heat transfer from molten salt droplets in various gases [Текст] / S. Ghandehariun, M.A. Rosen, M. Agelin-Chaab, G.F. Naterer // Int. J. Heat Mass Transfer, 2017. – V. 105. – P. 140–146.
134. Ghasemi, A. Effects of droplet size and air preheating on soot formation in turbulent combustion of liquid fuel [Текст] / A. Ghasemi, M. Moghiman, S. Javadi, N. Hossenini // Proceedings of the ASME 2010, 10th Biennial Conference on Engineering Systems Design and Analysis, 2010. – P. 1-7.
135. Godoy, W.F. Radiation driven evaporation for polydisperse water sprays [Текст] / W.F. Godoy, P.E. DesJardin // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2009. – V. 52. – P. 2893–2901.

136. Goh, T.Y. Performance analysis of image thresholding: Otsu technique [Текст] / Ta Yang Goh, Shafriza Nisha Basah, Haniza Yazid, Muhammad Juhairi Aziz Safar, Fathinul Syahir Ahmad Saad // Measurement, 2018. – V. 114. – P. 298-307.
137. Gokulakrishnan, P. Experimental and kinetic modeling of kerosene-type fuels at gas turbine operating conditions [Text] / P. Gokulakrishnan, G. Gaines, M.S. Klassen, R.J. Roby, J. Currano // J. Eng. Gas Turb. Power, 2007. – V. 129, №. 3. – P. 655-664.
138. Goldfarb, I. Thermal radiation effect on thermal explosion in gas containing fuel droplets [Текст] / I. Goldfarb, V. Gol'dshtein, G. Kuzmenko, S.S. Sazhin // Combust. Theory Model., 1999. – V. 3. – P. 769–787.
139. Goossens, A.G. Prediction of molecular weight of petroleum fractions [Text]/A.G. Goossens//Industrial & Engineering Chemistry Research, 1996. – V. 35, №. 3. – P. 985–988.
140. Govindaraju, P.B. Formulation of optimal surrogate descriptions of fuels considering sensitivities to experimental uncertainties [Text] / P.B. Govindaraju, M. Ihme // Combustion and Flame, 2018. – V. 188. – P. 337–356.
141. Green, D.W. Perry's chemical engineers' handbook [Text] / D.W. Green, R.H. Perry // The McGraw-Hill Companies, 2018. – 2641 p.
142. Grohmann, J. Gas turbine model combustor emissions of liquid single-component fuels [Текст] / J. Grohmann, W. Meier, M. Aigner // Proceedings of ASME Turbo Expo 2017. Turbomachinery Technical Conference and Exposition. – USA, 2017. – V. 4A. – P. 1-11.
143. Gueret, C. Experimental Study and Modeling of Kerosene Oxidation in a Jet-Stirred Flow Reactor [Text] / C. Gueret, M. Cathonnet, J.C. Boettner, F. Gaillard // Proc. Combust. Inst., 1990. – № 23. – P. 211-216.
144. Gurakov, N.I. A hybrid method for prediction the sauter mean diameter (D32) of kerosene sprays of pressure-swirl atomizers of small size gas turbine engines [Текст] / N.I. Gurakov, S.G. Matveev, I.A. Zubrilin,

A.A. Didenko, M. Hernandez Morales, V.V. Yastrebov, D.V. Yakushkin // 2021 International Scientific and Technical Engine Conference (EC), 2023. – P. 1-4.

145. Gurakov, N.I. A study on the geometric characteristic influence on the liquid fuel flow in a three-way pressure-swirl atomizer [Текст] / N.I. Gurakov, M.H. Morales, I.A. Zubrilin, S.A. Bolychev, A.A. Didenko, S.G. Matveev // Journal of Physics: Conference Series, 2021. – V. 1891. – P. 012021.

146. Gurakov, N.I. Validation of the VOF method for liquid spray process simulation from a pressure-swirl atomizer [Текст] / N.I. Gurakov, I.A. Zubrilin, V.Y. Abrashkin, M.H. Morales, D.V. Yakushkin, V.V. Yastrebov, O.V. Kolomzarov, D.V. Idrisov // AIP Conference Proceedings, 2020. – P. 020031.

147. Gusev, I.G. A study of the species diffusion equation in the presence of the moving boundary [Текст] / I.G. Gusev, P.A. Krutitskii, S.S. Sazhin, A. Elwardany // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2012. – V. 55. – P. 2014–2021.

148. Hayashi, J. Effects of fuel droplet size on soot formation in spray flames formed in a laminar counterflow [Текст] / J. Hayashi, H. Watanabe, R. Kurose, F. Akamatsu // Combustion and Flame, 2011. – V. 158. – P. 2559–2568.

149. Haywood, R.J. A detailed examination of gas and liquid transient processes in convection and evaporation [Текст] / R.J. Haywood, R. Nafziger, M. Renksizbulut // J Heat Transfer, 1989. – V. 111. – P. 495–502.

150. Hernandez Morales, V. A methodology for calculating the properties of aircraft kerosene surrogates that affect the atomization and evaporation characteristics [Текст] / M. Hernandez Morales, I.A. Zubrilin, S.G. Matveev, A.A. Didenko, V.M. Anisimov, K.D. Tsapenkov // 2021 International Scientific and Technical Engine Conference (EC), 2023. – P.1-5.

151. Honnet, S. A surrogate for kerosene [Text] / S. Honnet, K. Seshadri, U. Niemann, N. Peters // Proc. Combust. Inst., 2009. – V. 32, № 1. – P. 485-492.

152. Huber, M.L. Surrogate mixture models for the thermophysical properties of aviation fuel Jet-A [Text] / M.L. Huber, E.W. Lemmon, T.J. Bruno // Energy Fuels, 2010. – V. 24, №. 6. – P. 3565-3571.

153. Humer, S. Experimental and kinetic modeling study of combustion of JP-8, its surrogates and reference components in laminar nonpremixed flows [Text] / S. Humer, A. Frassoldati, S. Granata, T. Faravelli, E. Ranzi, R. Seiser // Proceedings of the Combustion Institute, 2007. – V. 31, №. 1. – P. 393-400.

154. IP 123 Petroleum products. Determination of distillation characteristics at atmospheric pressure [Электронный ресурс]. – URL: <https://publishing.energyinst.org/ip-test-methods/full-list-of-ip-test-methods-publications/ip-123-petroleum-products-determination-of-distillation-characteristics-at-atmospheric-pressure> (дата обращения: 01.01.2023).

155. ISO 3405:2019 Petroleum and related products from naturals or synthetic sources. Determination of distillation characteristics at atmospheric pressure [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.iso.org/standard/67956.html> (дата обращения: 01.01.2023).

156. Jameel, A.G.A. A minimalist functional group (MFG) approach for surrogate fuel formulation [Текст] / A.G.A. Jameel, N. Naser, G. Issayev [et al.] // Combustion and Flame, 2018. – V. 192. – P. 250–271.

157. Jameel, A.G.A. Surrogate formulation for diesel and jet fuels using the minimalist functional group (MFG) approach [Текст] / A.G.A. Jameel, N. Naser, A.H. Emwas, S. M. Sarathy // Proceedings of the Combustion Institute, 2019. – V. 37, №. 4. – P. 4663–4671.

158. Joh, R. Properties of pure fluid substances [Текст] / R. Joh, M. Kleiber // 2010. – 111 с.

159. Kauffman, C.W. Effect of local parameters on gas turbine emissions [Текст] / C. W. Kauffman, S. M. Correa, N. J. Orozco // J. Aircraft, 1982. – V. 19, №. 8.

160. Kim, D. A surrogate for emulating the physical and chemical properties of conventional jet fuel [Text] / D. Kim, J. Martz, A. Violi // *Combustion and Flame*, 2014. – V. 161, № 6. – P. 1489–1498.
161. Klingsporn, M. Vaporization of a binary unsteady spray at high temperature and high pressure [Текст] / M. Klingsporn, U. Renz // *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1994. – V. 37, № 1. – P. 265-272.
162. Kolomzarov, O.V. Experimental investigation of the combustion of a pre-vaporated surrogate of aviation kerosene in a lab-scale combustion chamber [Текст] / O.V. Kolomzarov, V.Yu. Abrashkin, I.A. Zubrilin, S.G. Matveev, M.D. Gamirullin, R.A. Azimov, A.M. Sipatov // *2021 International Scientific and Technical Engine Conference (EC)*, 2023. – P. 1-6.
163. Lage, P.L.C. Nonideal vaporization of dilating binary droplets with radiation absorption [Текст] / P.L.C. Lage, C.M. Hackenberg // *Combustion and Flame*, 1995. – V. 101. – P. 36-44.
164. Laurent, C. Developpement et validation de modeles d'evaporation multi-composant [Текст]: дис. на соискание ученой степени канд. тех. наук.: защищена 26.06.2008/Laurent Claise. – Франция, 2008. – 253 с.
165. Lefebvre, A.H. Gas turbine combustion. Alternative Fuels and emissions. [Текст] / A.H. Lefebvre, D.R. Ballal // CRC Press: Taylor & Francis Group. New York, 2010. – 537 p.
166. Li, A. Development and validation of surrogates for RP-3 jet fuel based on chemical deconstruction methodology [Текст] / Ang Li, Zhenyingnan Zhang, Xiaogang Cheng, Xingcai Lu, Lei Zhu, Zhen Huang // *Fuel*, 2020. – V. 267. – P. 116975.
167. Lindstedt, R.P. Detailed chemical-kinetic model for aviation fuels [Text] / R.P. Lindstedt, L.Q. Maurice // *J. Propulsion and Power*, 2000. – V. 16, № 2. – P. 187-195.
168. Markadeh, R.S. Droplet evaporation under spray-like conditions [Текст] / R.S. Markadeh, A. Arabkhalaj, H. Ghassemi, A. Azimi // *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020. – V. 148. – P. 119049.

169. Matveev, S.S. Experimental study of the combustion of surrogates of aviation kerosene TS-1 [Текст] / S.S. Matveev, D.V. Idrisov, S.G. Matveev, N.I. Gurakov, M.Y. Anisimov, A.S. Savchenkova, I.A. Zubrilin, M.H. Morales // AIP Conference Proceedings, 2020. – V. 2304, №. 1. – P. 020014.

170. Matveev, S.S. Investigation of fuel distribution in partially premixed swirled burner with pilot flame [Текст] / S.S. Matveev, I.A. Zubrilin, M.Y. Orlov // Proceedings of the ASME Turbo Expo, 2016. – Vol. 4B.

171. Mensch, A. Sooting characteristics of surrogates for jet fuels [Текст] / Amy Mensch, Robert J. Santoro, Thomas A. Litzinger, S.-Y. Lee // Combustion and Flame, 2010. – V. 157, №. 6. – P. 1097-1105.

172. Miller, R.S. Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many droplet gas-liquid flow simulations / R.S. Miller, K. Harstad, J. Bellan // International Journal of Multiphase Flow, 1998. – V.24. – P. 1025 –1055.

173. Mishra, R. Effect of fuel particle size on the stability of swirl stabilized flame in a gas turbine combustor [Текст] / R. Mishra, S. K. Kumar, S. Chandel // Int. J. Turbo Jet Engines, 2015. – V. 32, №. 2. – P. 129-141.

174. Mishra, R.K. Numerical analysis of exhaust emission from an aero gas turbine combustor under fuel-rich condition [Текст] / R.K. Mishra, S. Chandel // Int. J. Turbo Jet Engines, 2017.

175. Morales, M.H. Formation of surrogates of hydrocarbon fuels using the characteristics of their atomisation, heating, evaporation and combustion [Текст] / Mario H. Morales, Konstantin D. Tsapenkov, Ivan A. Zubrilin, Denis V. Yakushkin, Alexander S. Semenikhin, Sergei S. Sazhin, Sergei G. Matveev // Combustion science and technology, 2023.

176. Morales, M.H. Studying unsteady combustion processes that occur in an annular combustion chamber of a gas turbine engine [Текст] / M.H. Morales, I.A. Zubrilin, N.I. Gurakov // Journal of Physics: Conference Series, 2021. – Vol. 1891, №. 1. – P. 1-6.

177. NIST Chemistry WebBook [Электронный ресурс]. – URL: <https://webbook.nist.gov/chemistry/> (дата обращения: 01.01.2023).
178. Olguin, H. Influence of evaporation on spray flamelet structures [Текст] / H. Olguin, E. Gutheil // *Combust Flame*, 2014. – V. 161, №. 4.– P. 987–96.
179. Olson, D.B. The effects of molecular structure on soot formation II. Diffusion flames [Текст] / D.B. Olson, J.C. Pickens, R.J. Gill // *Combustion and Flame*, 1985. – V. 62, №. 1, P. 43-60.
180. Pan, K.L. On droplet combustion of biodiesel fuel mixed with diesel/alkanes in microgravity condition [Текст] / K.L. Pan, J.W. Li, C.P. Chen, C.H. Wang // *Combustion and Flame*, 2009. – V. 156. – P. 1926–1936.
181. Perry, R.H. Perry's chemical handbook [Текст] / Robert H. Perry, Don W. Green // McGraw-Hill Education, 2008. – 2400 с.
182. Pinheiro, A.P. Modelling of aviation kerosene droplet heating and evaporation using complete fuel composition and surrogates [Текст] / Abgail P. Pinheiro, Oyuna Rybdylova, Ivan A. Zubrilin, Sergei S. Sazhin, Fernando Luiz Sacomano Filho, Joao Marcelo Vedovotto // *Fuel*, 2021. – V. 305. – P. 121564.
183. Poinso, T. Theoretical and numerical combustion [Текст] / Theirry Poinso, Denis Veynante // R.T. Edwards, 2005. – 522 p.
184. Polyanin, A.D. Hydrodynamics, mass and heat transfer in chemical engineering [Текст] / A.D. Polyanin, A.M. Kutepov, A.V. Vyazmin, D.A. Kazenin – Taylor & Francis, 2002. – P. 149–214.
185. Poulton, L. Modelling of multi-component kerosene and surrogate fuel droplet heating and evaporation characteristics: A comparative analysis [Текст] / L. Poulton, O. Rybdylova, I.A. Zubrilin, S.G. Matveev, N.I. Gurakov, M. Al Qubeissic, N. Al-Esawi, T. Khan, V.M. Gun'ko, S.S. Sazhin // *Fuel*, 2020. – V. 269. – P. 117115.
186. Rajak, U. Experimental and predicative analysis of engine characteristics of various biodiesels [Текст] / U. Rajak, P. Nashine, P.K.

Chaurasiya, T.N. Verma, D.K. Patel, G. Dwivedi // *Fuel*, 2021. – V. 285. – P. 119097.

187. Ranz, W.E. Evaporation from drops, part I and part II [Текст] / W.E. Ranz, W.R. Marshall Jr. // *Chem. Eng. Prog.*, 1952. – V. 48, №. 4. – P. 173–180.

188. Ranz, W.E. Vaporation from drops, part I [Текст] / W.E. Ranz, W.R. Marshall Jr. // *Chem. Eng. Prog.*, 1952. – V. 48, №. 3. – P. 141–146.

189. Ranzi, E. New reaction classes in the kinetic modeling of low temperature oxidation of n-alkanes [Текст] / E. Ranzi, C. Cavallotti, A. Cuoci, A. Frassoldati, M. Pelucchi, T. Faravelli // *Combustion and Flame*, 2015. – V. 162, №. 5. – P. 1679-1691.

190. Retzekas, E. Prediction of physical properties of hydrocarbons, petroleum, and coal liquid fractions [Текст] / E. Retzekas [et. al.] // *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2002. – V. 41, №. 6. – P. 1695–1702.

191. Rink, K.K. The influences of fuel composition and spray characteristics on nitric oxide formation [Текст] / K.K. Rink, A.H. Lefebvre // *Combust. Sci. and Tech*, 1989. – V. 68. – P. 1-14.

192. Sahu, V.K. Numerical modeling of steady burning characteristics of spherical ethanol particles in a spray environment [Текст] / V.K. Sahu, V. Raghavan, D.N. Pope, G. Gogos // *ASME Journal of Heat Transfer*, 2011. – V. 133. – P. 094502-1.

193. Sazhin S.S. A multi-dimensional quasi-discrete model for the analysis of Diesel fuel droplet heating and evaporation [Текст] / S.S. Sazhin, M. Al Qubeissi, R. Nasiri, V.M. Gun'ko, A.E. Elwardany, F. Lemoine, F. Grisch, M.R. Heikal // *Fuel*, 2014. – V. 129. – P. 238–266.

194. Sazhin, S.S. A quasi-discrete model for heating and evaporation of complex multicomponent hydrocarbon fuel droplets [Текст] / S.S. Sazhin, A. Elwardany, E.M. Sazhina, M.R. Heikal // *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2011. – V. 54. – P. 4325–4332.

195. Sazhin, S.S. A simplified model for bi-component droplet heating and evaporation [Текст] / S.S. Sazhin, A. Elwardany, P.A. Krutitskii, G.

Castanet, F. Lemoine, E.M. Sazhina, M.R. Heikal // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2010. – V. 53. – P. 4495–4505.

196. Sazhin, S.S. Advanced Models of Fuel Droplet Heating and Evaporation [Текст] / S.S. Sazhin // Progress in Energy and Combustion Science, 2006. – V. 32. – P. 162–214.

197. Sazhin, S.S. Droplets and sprays [Текст] / S.S. Sazhin // Springer, 2014. – 345 с.

198. Sazhin, S.S. Droplets and sprays: Simple models of complex processes [Текст] / S.S. Sazhin // Springer, 2022. – 597 с.

199. Sazhin, S.S. Modelling of biodiesel fuel droplet heating and evaporation [Текст] / S.S. Sazhin, M. Al Qubeissi, R. Kolodnytska, A. Elwardany, R. Nasiri, M.R. Heikal // Fuel, 2014. – V. 115. – P. 559–572.

200. Sazhin, S.S. Modelling of fuel droplet heating and evaporation: Recent results and unsolved problems [Текст] / S.S. Sazhin // Fuel, 2017. – V. 196. – P. 69-101.

201. Sazhin, S.S. Multi-component droplet heating and evaporation: Numerical simulation versus experimental data [Текст] / S.S. Sazhin, A. Elwardany, P.A. Krutitskii, V. Deprédurand, G. Castanet, F. Lemoine, E.M. Sazhina, M.R. Heikal // International Journal of Thermal Sciences, 2011. – V. 50. – P. 1164–1180.

202. Sazhin, S.S. Thermal ignition analysis of a monodisperse spray with radiation [Текст] / S.S. Sazhin, G. Feng, M.R. Heikal, I. Goldfarb, V. Goldshtein, G. Kuzmenko // Combust. Flame, 2001. – V. 124. – P. 684–701.

203. Semenikhin, A.S. Choice of a kerosene surrogate for prediction of the emission of carcinogenic polycyclic aromatic hydrocarbons [Текст] / A.S. Semenikhin, K.D. Tsapenkov, S.S. Novichkova, A.D. Popov, M.M. Hernandez, D.V. Idrisov, I.A. Zubrilin, S.S. Matveev, I.V. Chechet, S.G. Matveev // Proceedings of the conference “International conference on physics and chemistry of combustion and processes in extreme environments”, 2022. – P. 99.

204. Sharma, N. Influence of fuel volatility and spray parameters on combustion characteristics and NO_x emission in a gas turbine combustor [Текст] / N. Sharma, S. Som // Applied Thermal Engineering, 2004. – V. 24. – P. 885-903.
205. Siouris, S. Investigation of deposition in aviation gas turbine fuel nozzles by coupling of experimental data and heat transfer calculations [Текст] / S. Siouris, S. Blakey, C.W. Wilson // Fuel, 2013. – V. 106. – P. 79–87.
206. Sirignano, W.A. Fluid dynamics and transport of droplets and sprays [Текст] / Sirignano W.A. // Cambridge University Press, 2010. – 311 c.
207. Slavinskaya, N.A. On model design of a surrogate fuel formulation [Text] / N.A. Slavinskaya, A. Zizin, M. Aigner // Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 2010. – V. 132. – P. 1-11.
208. Snegirev, A. Advancement in turbulent spray modeling: the effect of internal temperature gradient in droplets [Текст] / A. Snegirev, V.A. Talalov, A.S. Tsoi, S.S. Sazhin, C. Crua // Proceedings of international symposium on advances in computational heat transfer, 2012.
209. Snegirev, A.Y. Transient temperature gradient in a single-component vaporizing droplet [Текст] / A.Y. Snegirev // Int. J. Heat Mass Transfer, 2013. – V. 65. – P. 80–94.
210. Sontheimer, M. Grid dependence of evaporation rates in Euler-Lagrange simulations of dilute sprays [Текст] / M. Sontheimer, A. Kronenburg, O.T. Stein // Combustion and Flame, 2021. – V. 232. – P. 111515.
211. Starinskaya, E.M. Evaporation of water/ethanol droplets in an air flow: Experimental study and modelling. [Текст] / E.M. Starinskaya, N.B. Miskiv, A.D. Nazarov, V.V. Terekhov, V.I. Terekho, O.D. Rybdylova, S.S. Sazhin // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2021. – V. 177. – P. 121502.
212. Strelkova, M. I. Detailed and Reduced Mechanisms of Jet a Combustion at High Temperatures, Combustion Science and Technology [Text] / M.I. Strelkova, I.A. Kirillov, B.V. Potapkin, A.A. Safonov, L.P. Sukhanov, S.Y.

Umanskiy, M.A. Deminsky, A.J. Dean, B. Varatharajan, A.M. Tentner // *Combustion science and technology*, 2008. – V. 180, №. 10. – P. 1788 – 1802.

213. Strizhak, P.A. Application of the laser induced phosphorescence method to the analysis of temperature distribution in heated and evaporating droplets [Текст] / P.A. Strizhak, R.S. Volkov, D.V. Antonov, G. Castanet, S.S. Sazhin // *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020. – V. 163. – P. 120421.

214. Talley, D.G. A semi-empirical approach to thermal and composition transients inside vaporizing fuel droplets [Текст] / D.G. Talley, S.C. Yao // *Proceedings of Twenty-first Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, 1986. – P. 609–616.

215. Tonini, S. An analytical model of liquid drop evaporation in gaseous environment [Текст]/Tonini S., Cossali G.E.//*Int. J. Therm. Sci.*, 2012. – V. 57. – P. 45–53.

216. Tseng, C.C. Effect of radiation absorption on fuel droplet evaporation [Текст] / C.C. Tseng, R. Viskanta // *Combustion Science and Technology*, 2005. – V. 177. – P. 1511–1542.

217. Van de Hulst, H.C. Light scattering by small particles [Текст] / H.C. Van de Hulst // *Dover Publications Inc.*, 1957. – 470 c.

218. Vasu, S.S. Jet fuel ignition delay times: Shock tube experiments over wide conditions and surrogate model predictions [Text] / S.S. Vasu, D.F. Davidson, R.K. Hanson // *Combust. Flame*, 2008. – V. 152, №. 1. – P. 125–143.

219. Vozka, P. Impact of alternative fuel blending components on fuel composition and properties in blends with Jet A [Text] / P. Vozka, D. Vrtiska, P. Šimaček, G. Kilaz // *Energy Fuels*, 2019. – V. 33, №. 4. – P. 3275-3289.

220. Wang, F. Kerosene evaporation rate in high temperature air stationary and convective environment [Текст] / Fang Wang, Rui Liu, Min Li, Jie Yao, Jie Jin // *Fuel*, 2018. – V. 211. – P. 582–590.

221. Won, S.H. Preferential vaporization impacts on lean blow-out of liquid fueled combustors [Text] / S.H. Won, N. Rock, S.J. Lim, S. Nates, D.

Carpenter, B. Emerson, T. Liewen, T. Edwards, F.L. Dryer // *Combustion and Flame*, 2019. – V. 205. – P. 295–304.

222. Won, S.H. Reconstruction of chemical structure of real fuel by surrogate formulation based upon combustion property targets [Text] / S.H. Won, F.M. Haas, S. Dooley, T. Edwards, F.L. Dryer // *Combust. Flame*, 2017. – V. 183. – P. 39–49.

223. Xue, S. Flame stabilization of liquid oxygen/kerosene bi-swirl injector at elevated pressure [Текст] / Shuaijie Xue, Liu Hong, Hongjun Liu, Hongyu Chen // *Combustion and Flame*, 2022. – V. 244. – P. 112215.

224. Yang, D. Experimental study on the evaporation characteristics of the kerosene gel droplet [Текст] / D. Yang, Z. Xia, L. Huang, L. Ma, Y. Feng, Y. Xiao // *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2018. – V. 93. – P. 171–177.

225. Yaws, C.L. Thermophysical properties of chemicals and hydrocarbons [Текст] / C.L. Yaws // William Andrew, Norwich, 2008. – 816 c.

226. Yaws, C.L. Transport properties of chemicals and hydrocarbons. Viscosity, thermal conductivity, and diffusivity of C1 to C100 organics [Текст] / Carl L. Yaws // William Andrew, 2009. – 602 c.

227. Yaws, C.L. Yaw's handbook of thermodynamic and physical properties of chemical compounds [Текст] / Carl L. Yaws // Knovel Corporation, 2003. – 777 c.

228. Yeol, J.C. Numerical methods for equations and its applications [Текст] / J.C. Yeol, K.A. Ioannis, H. Said // CRC Press, Taylor and Francis Group, 2012. – 462 c.

229. Yu, J. Comprehensive surrogate for emulating physical and kinetic properties of jet fuels [Текст] / Jin Yu, Xiaolong Gou // *Journal of propulsion and power*, 2018. – V. 34, №. 3. – 11 c.

230. Yu, J. Surrogate fuel formulation for oxygenated and hydrocarbon fuels by using the molecular structures and functional groups [Text] / J. Yu, Y. Ju, X. Gou // *Fuel*, 2016. – V. 166. – P. 211-218.

231. Zahmatkesh, I. Effect of liquid fuel droplet size on soot emission from turbulent spray flames [Текст] / I. Zahmatkesh, M. Moghiman // Iranian Journal of Science & Technology, Transaction B, Engineering, 2006. – V. 30, №. B3.

232. Zeoli, N. Numerical modelling of metal droplet cooling and solidification [Текст] / N. Zeoli, S. Gu, S. Kamnis // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2008. – V. 51. – P. 4121–4131.

233. Zimont, V. Gas premixed combustion at high turbulence. Turbulent flame closure model combustion model [Text] / V. Zimont // Experimental Thermal and Fluid Science, 2000. – P. 179–186.

234. Zimont, V.L. A numerical model of premixed turbulent combustion of gases [Text] / V.L. Zimont, A.N. Lipatnikov // Chem. Phys. Report, 1995. – P. 993-1025.