

Научная статья

УДК 621.45.022

URL: <https://vestnikmai.ru/publications.php?ID=183596>

EDN: <https://www.elibrary.ru/POOTRJ>



Численное определение эмиссии канцерогенных углеводородов камерами сгорания авиационных газотурбинных двигателей

Александр Сергеевич Семенихин^{1✉}, Сергей Геннадьевич Матвеев², Никита Игоревич Гураков³,
Дмитрий Владимирович Идрисов⁴, Сергей Сергеевич Матвеев⁵, Алексей Александрович Диденко⁶

^{1, 2, 3, 4, 5, 6} Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева (Самарский университет),

Самара, Российская Федерация

¹ semenikhin.as@ssau.ru ✉

² msg@ssau.ru

³ gurakov.ni@ssau.ru

⁴ idrisov.dv@ssau.ru

⁵ matveev@ssau.ru

⁶ didenko.aa@ssau.ru

Аннотация. Представлены результаты численного определения эмиссии канцерогенных полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) камерой сгорания (КС) авиационного газотурбинного двигателя (ГТД), прототипа серийного образца. Рассматриваются подходы комбинированного реакторного моделирования. Результаты CFD-моделирования рабочих процессов использованы для представления расчетной области последовательностью химических реакторов с идеализированной газовой динамикой для сложных кинетических вычислений в одномерной постановке. Решаются соответствующие задачи трехмерного моделирования, показан процесс настройки подмоделей ANSYS Fluent для описания горения керосина. Реакторные модели камеры разработаны с применением алгоритмов CFD-Energico-Chemkin и Fluent-CRN. Результаты вычислений сопоставлены с экспериментально определенными значениями.

Ключевые слова: эмиссия вредных загрязняющих веществ, сеть химических реакторов, CRN, камера сгорания, газотурбинный двигатель, полициклические ароматические углеводороды (ПАУ), бенз(а)пирен

Финансирование: работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 24-73-00288), <https://rscf.ru/project/24-73-00288/>

Для цитирования: Семенихин А.С., Матвеев С.Г., Гураков Н.И., Идрисов Д.В., Матвеев С.С., Диденко А.А. Численное определение эмиссии канцерогенных углеводородов камерами сгорания авиационных газотурбинных двигателей // Вестник Московского авиационного института. 2024. Т. 31. № 4. С. 167–176. URL: <https://vestnikmai.ru/publications.php?ID=183596>

Original article

Numerical Detection of Carcinogenic Hydrocarbons Emission by Aircraft Gas Turbine Engines Combustion Chambers

Aleksandr S. Semenikhin^{1✉}, Sergei G. Matveev², Nikita I. Gurakov³, Dmitrii V. Idrisov⁴,
Sergei S. Matveev⁵, Aleksei A. Didenko⁶

^{1, 2, 3, 4, 5, 6} Samara National Research University,

Samara, Russian Federation

¹ semenikhin.as@ssau.ru✉

² msg@ssau.ru

³ gurakov.ni@ssau.ru

⁴ idrisov.dv@ssau.ru

⁵ matveev@ssau.ru

⁶ didenko.aa@ssau.ru

Abstract

Aircraft engines environmental characteristics improving an up-to-date task on aviation impact minimizing on the environment. Among the aviation kerosene combustion products, carcinogenic polycyclic aromatic hydrocarbons (PAH) and sooty solid particles, such as microparticles and clusters, for which PAH are the basic reactants, may pose a particular threat to humans. Benzo(a)pyrene ($C_{20}H_{12}$) is considered to be the most carcinogenic PAH. For this reason, it serves as an indicator of the carcinogenic activity of the environment. As of today, the existing semi-empirical models for predicting benzo(a)pyrene emissions by aircraft engines are severely limited by the specific designs and operating conditions. Thus, the PAH concentration detection method elaboration, which does not require experimental studies, for environmental characteristics assesment of the projects being designed is up-to-date.

The PAH forming kinetic mechanisms depend on many factors. That is why, the PAH emissions by the GTE combustion chambers (CC) predicting is feasible only with concurrent application of the gas dynamics (CFD) numerical simulation and detailed chemical kinetics. In view of technical limitations, this problem is being solved with combined modeling techniques, where the of CFD calculations results with a simplified description of chemical processes are employed to represent the computational domain as a sequence of chemical reactors (Chemical Reactor Network - CRN) with idealized gas dynamics for kinetic calculations in a 0D- or 1D- formulation. Combined technique has been successfully applied to calculate the concentrations of carbon monoxide and nitrogen oxides, but its application to solving the practical problem of determining the emission of PAH by the combustion chambers of the stock GTEs is not available in the accessible literature. With the view of the above said, the purpose of this work consists in testing the combined CFD/CRN modeling with of TS-1 kerosene submodels (kinetic combustion model "A17" and model fuel UM1) to compute the benzo(a)pyrene emissions by the GTE CC.

To validate the performed computations, the data from the experimental study of a tubular combustion chamber model, a prototype of a stock product, are applied. The article solves the corresponding problems of the 3D-modeling and describes the process of setting up the ANSYS Fluent submodels to describe kerosene combustion. The CFD computations results are used to build the Fluent-CRN and CFD-Energico-Chemkin reactor models.

The semi-automated CFD-Energico-Chemkin algorithms allowed creating a reactor model of 25 reactors and computing benzo(a)pyrene concentrations with an accuracy comparable to the experimental one. The limited number of reactors does not allow describing combustion processes in detail in the entire volume of the GTE combustion chamber. That is why the results of modeling are mainly determined by the fact to what extent the applied algorithms allow highlighting the specific combustion zones, i.e. local conditions determining the PAH synthesis and burning-out.

The Fluent-CRN models describe combustion chamber by dint of several hundred reactors. The widely used algorithm involving the temperature distribution and the mean mixture fraction concentration from the PAH approach (solution of the averaged Navier-Stokes equations) to turbulence modeling did not produce satisfactory results, and the calculated PAH concentrations were underestimated by many orders of magnitude. At the same time, the LES approach (large eddy simulation) application in the CFD modeling of combustion chamber working processes and the subsequent construction of Fluent-CRN reactor models with account for pulsations of the mean mixture fraction gave the values of the PAH concentrations approaching the experimental ones. The latter allows inferring on the rationality of further development of this approach and corresponding submodels.

Keywords: emission of deleterious pollutants, chemical reactor network, CRN, combustion chamber, gas turbine engine, polycyclic aromatic hydrocarbons (PAH), benzo(a)pyrene

Funding: the work was financed by the Russian Science Foundation, Grant No. 24-73-00288, <https://rscf.ru/project/24-73-00288/>

For citation: Semenikhin A.S., Matveev S.G., Gurakov N.I., Idrisov D.V., Matveev S.S., Didenko A.A. Numerical Detection of Carcinogenic Hydrocarbons Emission by Aircraft Gas Turbine Engines Combustion Chambers. *Aerospace MAI Journal*, 2024, vol. 31, no. 4, pp. 167–176. (In Russ.). URL: <https://vestnikmai.ru/publications.php?ID=183596>

Введение

При сгорании углеводородных топлив образуются загрязняющие окружающую среду вещества. По этой причине эмиссионные характеристики авиационных двигателей и допустимые концентрации вредных веществ в зоне аэропортов нормируются местным законодательством и положениями Международной организации гражданской авиации (ИКАО). В частности, согласно решению совета ИКАО в отношении новых типов двигателей и двигателей, находящихся в производстве, с 2023 года действует стандарт на массовую и численную эмиссию нелетучих твердых частиц (ТЧ). Среди таких частиц – сажистые кластеры и микрочастицы, которые формируются преимущественно из полициклических ароматических углеводородов (ПАУ). Многие ПАУ являются сильнейшими канцерогенами, и по этой причине сажистые кластеры также представляют повышенную опасность для человека.

Государственные организации и ведущие предприятия устанавливают предельно допустимые концентрации ПАУ в рабочей зоне и окружающей среде, продуктах питания и т. д. Наиболее канцерогенным ПАУ считается состоящий из пяти ароматических циклов бенз(а)пирен ($C_{20}H_{12}$) (рис. 1). По этой причине он был выбран как индикатор канцерогенной активности среды, а вред других веществ может быть ранжирован с использованием коэффициентов токсической эквивалентности [1]. Так, относительный вклад бенз(а)пирена в общую «вредность» выхлопа ГТД можно оценить в 20–40% [1]. Примечательно, что удельный выброс бенз(а)-

пирена с отработавшими газами для авиационных газотурбинных двигателей (ГТД) составляет $EI_{БП} = 50 \dots 450$ мкг/кг топлива, что значительно выше, чем для двигателей внутреннего сгорания ($EI_{БП} = 1 \dots 110$ мкг/кг) и теплоэнергетических котлов ($EI_{БП} = 0,1 \dots 9$ мкг/кг) [1].

Необходимость применения углеводородных топлив в транспортном секторе и энергетике сохранится еще многие десятилетия. Таким образом, снижение эмиссии вредных веществ – ПАУ и сажистых ТЧ – остается актуальной задачей в рамках минимизации воздействия авиации на окружающую среду и при производстве современных конкурентоспособных низкоэмиссионных двигателей. Ввиду высокой ресурсоемкости экспериментальных исследований, при проведении современных НИОКР предварительно оценивают экологические характеристики камер сгорания двигателей еще на этапе проектирования, используя статистические данные и математические модели [2–4]. Так, для вычисления объемной доли сажи существуют два «классических» подхода: требующий значений концентрации ацетилена и более эффективный, использующий концентрации ПАУ [5]. Существуют полуэмпирические модели прогнозирования эмиссии ПАУ авиационными КС, применение которых сильно ограничено конкретными конструкциями и условиями эксплуатации [6, 7]. Кроме того, полуэмпирические модели не позволяют решать актуальные задачи исследования влияния топливных добавок [8] и внедрения экологичных авиационных топлив [9]. По этой причине актуальна разработка метода численного прогнозирования эмиссии ПАУ, не требующего проведения экспериментальных исследований. Наличие такого метода может способствовать повышению эффективности процессов проектирования КС, а также объективной оценке загрязнения окружающей среды авиационными ГТД.

Процессы образования ПАУ в пламени зависят от температуры, давления, химического состава топлива, характеристик турбулентных двухфазных потоков, включая нагрев и испарение капель, а также механизмов протекания газофазных реакций сотен химических веществ. Поэтому прогно-

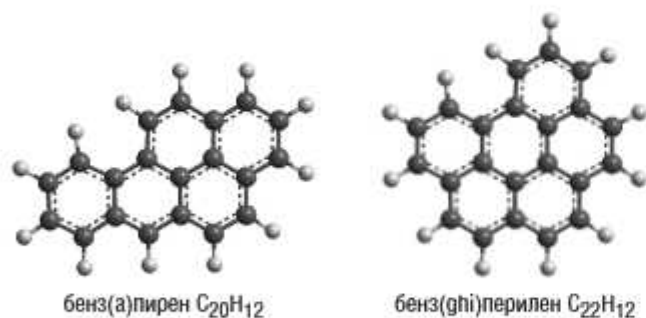


Рис. 1. Структура исследуемых ПАУ

зировать эмиссию ПАУ камерами сгорания ГТД можно только при одновременном использовании прямого численного моделирования газовой динамики (CFD) и детальной химической кинетики, что требует исключительно мощных вычислительных ресурсов и практически нереализуемо в настоящее время. Решением данной проблемы является применение методик комбинированного моделирования, где результаты CFD-вычислений с упрощенным описанием химических процессов используют для представления расчетной области последовательностью химических реакторов (Chemical Reactor Network (CRN)) с идеализированной газовой динамикой для кинетических вычислений в нульмерной или одномерной постановке [10–12].

В работах [10–12] показано, что комбинированные модели могут быть эффективными при соблюдении ряда условий, а именно: необходимо предварительно определить объемы и время пребывания газа для зон рециркуляции и интенсивного турбулентного смешения, а также осредненные значения температуры и состава топливоздушнoй смеси в них. Кроме того, рекомендуется выделение некоторых специфических зон внутри КС, например струй вторичного воздуха в зоне смешения. Типичные ошибки обычно объясняются недостаточной детализацией реакторной модели, для их устранения необходим более точный учет потерь теплоты, а также повышение точности кинетических моделей горения.

Для реализации детальных кинетических вычислений в реакторных моделях необходимо задать химический состав исходного топлива (в авиационном керосине содержится порядка сотни компонентов), который зависит от марки, сырья и производителя. Поэтому в вычислениях используют модельные топлива (суррогаты), состоящие из нескольких хорошо изученных углеводородов. Формирование суррогатов для решения конкретных задач является актуальной темой современных исследований. Отдельные зарубежные исследования показывают эффективность выбранных суррогатов при вычислении объемной доли сажи в пламени модельных горелок [5, 13]. Однако моделирование синтеза канцерогенных ПАУ, в частности для случаев турбулентного потока, характерного для КС ГТД, при этом представлено не было.

В рамках исследования процессов горения керосина российской марки ТС-1, в Самарском университете им. Королева также была разработана и валидирована кинетическая модель «А17» (374 вещества и 2719 реакций) [14], способная описать синтез ПАУ, и в том числе бенз(а)пирена. Вычисления с использованием модели «А17» позволили вы-

брать два суррогата: SU4 [14] и UM1 [15], наиболее близкие к топливу марки ТС-1, а также обеспечивающие удовлетворительные прогнозы концентраций ПАУ в пламени модельных установок [14].

Результаты краткого обзора доступной литературы показывают, что, несмотря на наличие выше-названных перспективных моделей (модели CFD, CRN, кинетическая модель горения и суррогаты), комбинированное моделирование не применялось для решения практической задачи определения эмиссии канцерогенных ПАУ камерами сгорания серийных ГТД. Ввиду вышесказанного целью настоящей работы является опробование комбинированного CFD/CRN-моделирования в совокупности с подмоделями керосина ТС-1 («А17», UM1) для вычисления эмиссии бенз(а)пирена камерой сгорания ГТД.

Экспериментальное определение эмиссии ПАУ

Для валидации расчетов используются данные экспериментального исследования модельной трубчатой КС, прототипа серийного изделия, представленные в работе [16]. В камере реализованы основные процессы, характерные для КС ГТД: подвод топлива и его распыл центробежной форсункой, формирование газодинамического течения с зоной обратных токов и стабилизацией пламени. Пробоотбор в выходном сечении КС осуществлялся охлаждаемым пробоотборником, стандартный газовый анализ основных продуктов сгорания был дополнен методом высокоэффективной жидкостной хроматографии для ПАУ. Оценка точности показала, что с доверительной вероятностью 0,95 погрешность измерения концентраций не превышает $\pm 15\%$ для ПАУ и $\pm 5\%$ для основных продуктов горения [16].

CFD-моделирование рабочих процессов камеры сгорания

Геометрическая модель КС построена в программе Siemens NX с рядом упрощений, а именно удалены скругления и области с малыми углами (менее 15°). Для численного моделирования построена объемная сеточная модель с типом ячеек гексаэдр (hexcore) в основной области и 6-угольная призма (polyhedra) в пристеночной области с количеством слоев, равным 5. В связи с формированием интенсивных вихревых потоков в первичной зоне горения КС уменьшен размер элементов сеточной модели. Для режима «холодной продувки» проведено исследование сеточной независимости, которое показало, что при использовании свыше 11,9 млн штук конечных элементов результаты вычислений практически не различаются. Приблизительный размер конечных элементов в области горения со-

ставил 1 мм. Максимальный параметр скошенности равен 0,94.

Численное моделирование выполнено с использованием программного пакета ANSYS Fluent [17] для режима работы КС, соответствующего экспериментальным исследованиям: приведенная скорость на входе $\lambda_k = 0,20$; температура и давление на входе $T_k = 423\text{K}$ и $p_k = 99\text{ кПа}$; коэффициент избытка воздуха в КС $\alpha = 6,7$ [16] (в расчете α использована брутто-формула $C_{10}H_{22}$, расход топлива $G_f = 4,595 \cdot 10^{-3}\text{ кг/с}$). Описание впрыска топлива реализовано с помощью модели дискретной фазы (DPM) [17]. Для испарения суррогата керосина использована встроенная в ANSYS Fluent модель для жидкого топлива “kerosene-liquid”, таким образом, фазовый переход всех компонентов суррогата осуществляется аналогично таковому в реальном керосине. Выбран тип распыла “cone” (конус), параметры распыла топлива определяли согласно разработанной гибридной методике [18], которая была валидирована для ряда форсунок, в том числе для задействованной в настоящем исследовании. Некоторые параметры DPM-модели представлены в табл. 1.

CFD-расчет выполнен как с использованием RANS-подхода (решение осредненных уравнений Навье – Стокса) к моделированию турбулентности в трехмерной стационарной постановке, так и с применением LES-подхода (моделирование крупных вихрей) к моделированию турбулентности в нестационарной постановке [17]. Благодаря быстрой сходимости и относительно низким требованиям к объему памяти применена базовая для решения промышленных задач $k-\epsilon$ модель турбулентности [19]. Исходя из баланса между точностью и временем вычислений, использована модель горения Flamelet Generated Manifold (FGM) [20].

Для описания термохимического состояния выбрана кинетическая модель «A17» [14] и суррогат керосина UM1 (состав в мольных долях: 38,44% н-додекан, 14,84% изоцетан, 23,36% метилциклогексан, 23,36% толуол) [15]. Атмосферный воздух моделировался смесью азота и кислорода в пропорции 79% N_2 и 21% O_2 (мольные доли).

Визуализация CFD-вычислений представлена на рис. 2, где показаны поля распределения значений температур и коэффициента избытка воздуха в продольном и выходном сечениях КС. Отображен типичный для «богато-бедной» камеры сгорания ГТД процесс сжигания топлива. Первый ряд отверстий подвода воздуха совместно с фронтальным устройством образует первичную «богатую» зону горения и зону обратных токов с температурой около 1100–1300 К. В периферийных зонах за счет смешения с воздухом формируются небольшие области горения при около-стехиометрических составах смеси. В зоне смешения происходит интенсивное обеднение продуктов сгорания, которые выносятся из КС при температурах порядка 700–900 К. При этом наблюдается характерная для данной конструкции КС неравномерность полей значений температуры и коэффициента избытка воздуха на выходе из КС, что согласуется с результатами экспериментальных исследований.

Расчитанные с использованием CFD-моделирования (для подходов RANS и LES) и осредненные по массе в выходном сечении значения концентраций основных продуктов сгорания (CO_2 , H_2O) практически идентичны (табл. 2). Отличие от экспериментальных данных составляет 14% для CO_2 , и 27% для H_2O , что является приемлемым результатом с учетом влияния существенной неравномерности полей температуры и концентраций веществ в выходном сечении модельной КС, в том числе и на точность измерения состава

Таблица 1

Параметры DPM-модели

| № | Параметр | Значение | Единица измерения |
|----|---|----------|------------------------------|
| 1 | Расход топлива, G_f | 4,595 | $\times 10^{-3}\text{ кг/с}$ |
| 2 | Температура топлива, T_f | 300 | К |
| 3 | Скорость истечения, u | 5 | м/с |
| 4 | Угол распыла, ϕ | 52 | градусы |
| 5 | Наружный радиус, d | 3,5 | $\times 10^{-3}\text{ м}$ |
| 6 | Минимальный диаметр, D_{min} | 25 | $\times 10^{-6}\text{ м}$ |
| 7 | Максимальный диаметр, D_{max} | 160 | $\times 10^{-6}\text{ м}$ |
| 8 | Средний диаметр капель по Заутеру, D_{32} | 127 | $\times 10^{-6}\text{ м}$ |
| 9 | Количество потоков | 15 | – |
| 10 | Параметр распределения (дисперсности) | 4 | – |

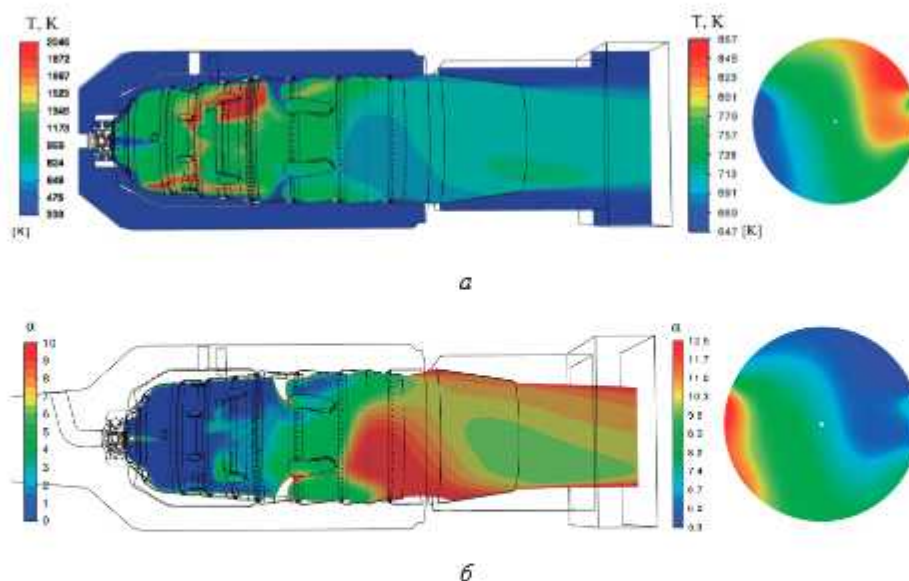


Рис. 2. Поля значений температуры (а), коэффициента избытка воздуха (б) в осевом сечении и на выходе из камеры сгорания, полученные в результате CFD-вычислений (RANS-подход)

продуктов сгорания. Таким образом валидация CFD-вычислений экспериментальными данными обосновывает возможность применения расчетов для построения реакторных моделей рабочего процесса КС ГТД.

Кинетическое моделирование эмиссии ПАУ последовательностью химических реакторов

Методика комбинированного моделирования эмиссии ПАУ для газового топлива описана в работе [12], где при отсутствии двухфазности и сравнительно высокой интенсивности смешения модель КС была представлена последовательностью всего шести реакторов идеального смешения (PSR) с фиксированными температурой и коэффициентом избытка воздуха. При этом из результатов исследований существующих конвертированных двигателей известно, что даже в случаях «бедного» сжигания предварительно подготовленной смеси по схеме LPP (Lean Prevaporized Premixed)

на выходе из кольцевых КС может наблюдаться значительная окружная неравномерность температуры, что приводит к прогару лопаток соплового аппарата [21, 22]. В случаях же «богато-бедного» сжигания керосина также возрастает локальная неравномерность топливовоздушной смеси, температуры и состава продуктов сгорания [1, 7], поэтому представление расчетной области КС авиационных ГТД последовательностью химических реакторов (CRN-модель) должно быть более детализированным.

Для построения детализированных CRN-моделей используются и совершенствуются алгоритмы, частично автоматизирующие эти процессы и реализованные в различных программных продуктах, например: Fluent-CRN [17], ANSYS Energico [23], KPPSMOKE [24]. В рамках данной работы реакторные модели КС разработаны с применением алгоритмов Fluent-CRN (600–1000 реакторов) и ANSYS Energico (25 реакторов).

При реализации алгоритмов Fluent-CRN объем КС автоматически разделяется на заданное количество соединенных друг с другом реакторов идеального смешения (PSR). Подобные алгоритмы основаны на объединении конечных элементов с близкими значениями учитываемых параметров (например, температуры смеси, восстановленной концентрации топлива и т. д.). Массовый поток через сеть реакторов определяется из CFD-вычислений, а химический состав и температура — из последующего совместного решения моделью Finite-Rate Chemistry [17] (химические процессы протекают с конечной скоростью).

Таблица 2

Массовая доля основных продуктов горения в выходном сечении КС

| Наименование вещества | Эксперимент [16] | CFD | |
|-----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| | | RANS | LES |
| Ar | $1,29 \cdot 10^{-2}$ | — | — |
| N ₂ | $7,47 \cdot 10^{-1}$ | $7,6 \cdot 10^{-1}$ | $7,6 \cdot 10^{-1}$ |
| O ₂ | $1,97 \cdot 10^{-1}$ | $2,05 \cdot 10^{-1}$ | $2,04 \cdot 10^{-1}$ |
| H ₂ O | $1,34 \cdot 10^{-2}$ | $9,8 \cdot 10^{-3}$ | $9,8 \cdot 10^{-3}$ |
| CO ₂ | $2,83 \cdot 10^{-2}$ | $2,44 \cdot 10^{-2}$ | $2,47 \cdot 10^{-2}$ |

На первом этапе построение Fluent-CRN-модели КС выполнено на основе результатов CFD RANS-расчетов с выбором таких параметров, как восстановленная концентрация топлива и температура. Известно, что результаты Fluent-CRN-моделирования зависят от заданного числа реакторов. По этой причине выполнено исследование реакторной независимости решения, которое показывает, что при использовании более 500–600 реакторов для данной геометрии КС расчетные концентрации веществ в продуктах сгорания изменяются незначительно. Затем реакторная модель КС была построена по данным, полученным при использовании LES-подхода в моделировании турбулентных течений КС. При этом сформированная CRN-модель дополнительно учитывала пульсацию восстановленной концентрации топлива, а общее число реакторов было увеличено до 1000.

Результаты Fluent-CRN-вычислений концентраций в выходном сечении КС для бенз(а)пирена и сопутствующего ему бенз(г, h, i)перилена ($C_{22}H_{12}$, рис. 1) представлены в табл. 3, из которой видно, что при использовании подхода Fluent-CRN (RANS) получены существенно заниженные значения концентраций данных ПАУ, что нельзя объяснить недостаточным числом задействованных реакторов. При этом учет пульсаций восстановленной концентрации топлива в подходе Fluent-CRN (LES) позволяет заметно приблизиться к экспериментально определенным значениям, однако расхождение данных все еще остается существенным.

В отличие от Fluent-CRN, графический интерфейс подхода Energico позволяет отслеживать положение зон КС, описываемых с помощью того или иного реактора, и проводить их слияние или повторное разбиение, а также сочетать PSR с реакторами идеального вытеснения (PFR) или частичного смешения (PaSR). В то же время постобработка CFD-расчета для КС, аналогичных исследуемой (11,9 млн штук конечных элементов), может потребовать значительных вычислительных мощностей, что делает применение большого числа реакторов (более 50–100) и их визуальный учет затруднительным. Такое ограничение числа реакторов не позволяет подробно рассматривать процессы горения во всем объеме КС ГТД и, следовательно,

использовать в полной мере преимущества LES-вычислений. По этой причине в настоящей работе для построения модели Energico используются данные RANS-вычислений. Исходя из доступных вычислительных ресурсов, объемы реакторов были сформированы с указанием 10 участков сначала по коэффициенту избытка воздуха и затем по температуре. В результате были выделены 25 зон КС, каждая из которых представлена соответствующим цветом на рис. 3,а.

Результаты постобработки данных, полученных в ANSYS Energico, экспортируются в программу кинетического реакторного моделирования ANSYS Chemkin. Сформированная CFD Energico-Chemkin-модель из 25 реакторов PSR представлена на рис. 3,б. Модель описывает термохимическое состояние газа в выходном сечении КС с помощью трех крупных реакторов с соответствующими расходами газа и объемами, где концентрации веществ равномерно распределены. В качестве расчетных значений приняты концентрации в реакторе, занимающем большую часть выходного сечения. Настройки решателя приняты по умолчанию. Результаты CFD-Energico-Chemkin вычислений (табл. 3) удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными для бенз(а)пирена и несколько хуже для бенз(г, h, i)перилена. Таким образом, комбинированное моделирование CFD-Energico-Chemkin может быть использован для определения эмиссии бенз(а)пирена как индикатора присутствия канцерогенных ПАУ в объектах окружающей среды. Однако эффективность метода обусловлена не детализацией разбиения расчетной области на реакторы, а тем, насколько достоверно применяемый алгоритм сможет выделить основные и специфичные области горения, ответственные за синтез и выгорание ПАУ.

Выводы

Представлены результаты опробования комбинированного реакторного моделирования применительно к практической задаче численного определения эмиссии канцерогенных ПАУ камерами сгорания авиационных ГТД.

Результаты исследования показали, что для рассматриваемой конструкции КС и режимных параметров

Таблица 3

Концентрация ПАУ в выходном сечении КС, $г/м^3$

| Наименование вещества | Эксперимент [16] | Fluent-CRN | | Energico-Chemkin |
|-----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| | | RANS | LES | |
| Бенз(а)пирен | $2,77 \cdot 10^{-4}$ | $2,5 \cdot 10^{-21}$ | $1,6 \cdot 10^{-11}$ | $2,5 \cdot 10^{-4}$ |
| Бенз(г, h, i)перилен | $6,22 \cdot 10^{-4}$ | $1,3 \cdot 10^{-20}$ | $5,7 \cdot 10^{-10}$ | $5,76 \cdot 10^{-3}$ |

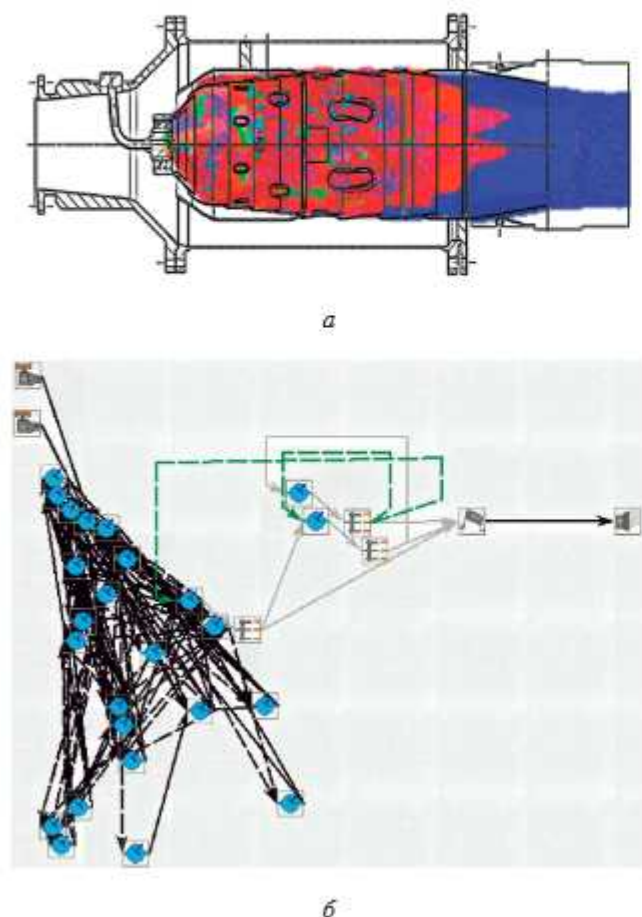


Рис. 3. Представление камеры сгорания моделью кинетических реакторов:
а – в программе ANSYS Energico (контур камеры сгорания наложен дополнительно);
б – в программе ANSYS Chemkin

проведенных опытов имеет место ряд критических недостатков: значительно неравномерный поток на выходе из КС и существование отдельных участков горения на уровне отверстий смешения. При этом известно, что синтез ПАУ в КС во многом определяется локальными условиями горения. Таким образом, требуется значительная детализация CRN-модели рабочих процессов при использовании керосина в КС авиационных ГТД – увеличение общего числа реакторов или включение реакторов для описания специфических зон внутри КС.

Независимость решения Fluent-CRN достигается при использовании нескольких сотен реакторов. Несмотря на известную эффективность подхода Fluent-CRN для прогнозирования концентраций основных продуктов сгорания (CO_2 и H_2O), оксида углерода (CO) и оксидов азота (NO_x), при задействованных в исследовании подмоделях вычисляемые концентрации ПАУ были занижены на многие порядки. В то же время использование LES-подхода в CFD-моделировании рабочих процессов камеры

сгорания и последующее построение Fluent-CRN-реакторных моделей, учитывающих пульсации восстановленной концентрации топлива, показали значения концентраций ПАУ, приближающиеся к экспериментальным. Последнее позволяет сделать вывод о целесообразности дальнейшего развития данного подхода и соответствующих подмоделей.

Полуавтоматизированные алгоритмы Energico позволили составить реакторную модель из 25 реакторов и вычислить концентрации бенз(а)пирена с точностью, сопоставимой с экспериментальной. Постобработка Energico для CFD-расчетов, аналогичных представленному, может потребовать значительных вычислительных мощностей, что делает применение большого числа реакторов и их визуальный учет затруднительным. Ограниченное число реакторов не позволяет детально описывать процессы горения во всем объеме КС ГТД, и по этой причине результаты моделирования во многом определяются тем, насколько достоверно используемые алгоритмы позволяют выделить основные и специфические зоны горения, т. е. локальные условия, определяющие синтез и выгорание ПАУ.

Улучшение прогностической способности представленных подходов является комплексной задачей, решение которой потребует, с одной стороны, повышения точности CFD-моделирования и определения дополнительных параметров для формирования CRN-моделей, а с другой стороны, уточнения кинетических данных о механизмах формирования ПАУ и совершенствования суррогатов реальных топлив, ориентированных на синтез ПАУ, а также получения новых экспериментальных данных об образовании ПАУ в пламени различных углеводородных топлив.

Список источников

1. Лукачев С.В., Матвеев С.Г., Орлов М.Ю. Выброс канцерогенов при сжигании углеводородных топлив: Учеб. пособие. – Самара: Изд-во САУ, 2007. – 160 с.
2. Орлов М.Ю., Зрелов В.А., Орлова Е.В. Использование статистических данных для предварительного проектирования камер сгорания двигателей узкофюзеляжных самолетов // Вестник Московского авиационного института. 2022. Т. 29. № 4. С. 151–160. DOI: 10.34759/vst-2022-4-151-160
3. Ткаченко А.Ю. Математическая модель рабочего тела для термогазодинамического расчета газотурбинного двигателя // Вестник Московского авиационного института. 2021. Т. 28. № 4. С. 180–191. DOI: 10.34759/vst-2021-4-180-191
4. Коваль С.Н., Бадерников А.В., Шмотин Ю.Н., Пятунин К.Р. Использование технологии цифрового двойника при разработке газотурбинных двигателей // Вестник

- Московского авиационного института. 2021. Т. 28. № 3. С. 139–145. DOI: 10.34759/vst-2021-3-139-145
5. Wen Z., Yun S., Thomson M.J., Lightstone M.F. Modeling soot formation in turbulent kerosene/air jet diffusion flames. *Combustion and Flame*. 2003;135(3):323–340. DOI: 10.1016/S0010-2180(03)00179-2
 6. Грига А.Д., Иваницкий М.С. Определение содержания бенз(а)пирена в уходящих газах камеры сгорания газовой турбины // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2014. Т.10. № 5. С. 86–88.
 7. Григорьев А.В., Митрофанов В.А., Рудаков О.А., Саливон Н.Д. Теория камеры сгорания. – СПб.: Наука, 2010. – 227 с.
 8. Пелевин В.С., Алексеев А.А., Филинов Е.П., Комисар Ю.В. Влияние примесей в авиационном топливе на параметры рабочего процесса и показатели эффективности газотурбинных двигателей и энергетических установок // Вестник Московского авиационного института. 2022. Т. 29. № 4. С. 186–195. DOI: 10.34759/vst-2022-4-186-195
 9. Калякина К.А., Калякин А.В., Файзуллин Р.Р., Егоров М.А. Декарбонизация авиаперевозок путем применения устойчивых авиационных топлив (SAF) // Научный вестник УИ ГА. 2022. № 14. С. 37–43.
 10. Козлов В.Е., Лебедев А.Б., Секундов А.Н. и др. Применение реакторных моделей для расчета эмиссионных характеристик диффузионных и гомогенных камер сгорания // Труды ЦИАМ № 1347 «Экологические проблемы авиации»: Сборник статей. М.: Торус Пресс, 2010. С. 321–338.
 11. Кутлумухамедов А.Р., Скиба Д.В., Бакиров Ф.Б. Обзор работ, посвященных оценке выбросов монооксида углерода из камер сгорания газотурбинных двигателей по реакторной модели, разработанной на базе результатов трехмерного моделирования // Вестник УГАТУ. 2022. Т. 26. № 1(95). С. 69–80. DOI: 10.54708/19926502_2022_2619569
 12. Чет И.В. Методика определения эмиссии канцерогенных ароматических углеводородов камерами сгорания газотурбинных двигателей и установок: Дисс. ... канд. техн. наук. – Самара, 2018. – 149 с.
 13. Xin S., Wang W., Yang F. et al. Soot and PAH formation in laminar diffusion flames of RP-3 jet kerosene and its surrogates at preheat temperature // *Fuel*. 2024. Vol. 361: 130735. DOI: 10.1016/j.fuel.2023.130735
 14. Семенikhин А.С., Идрисов Д.В., Чет И.В. и др. Кинетическая модель и суррогат керосина для расчета эмиссии канцерогенных углеводородов газотурбинными двигателями // Вестник Самарского университета. Аэрокосмическая техника, технологии и машиностроение. 2022. Т. 21. № 3. С. 58–68. DOI: 10.18287/2541-7533-2022-21-3-58-68
 15. Kim D., Martz J., Violi A. A surrogate for emulating the physical and chemical properties of conventional jet fuel // *Combustion and Flame*. 2014. Vol. 161. No. 6, pp. 1489–1498. DOI: 10.1016/j.combustflame.2013.12.015
 16. Матвеев С.Г., Чет И.В., Абрашкин В.Ю., Семенов А.В. Образование канцерогенных полициклических ароматических углеводородов в модельной камере сгорания ГТД // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2013. Т. 15. № 6–4. С. 881–885.
 17. ANSYS Fluent 21.2 User Guide. – Canonsburg, PA: ANSYS Inc., 2021.
 18. Gurakov N.I., Morales M.H., Zubrilin I.A. et al. A study on the geometric characteristic influence on the liquid fuel flow in a three-way pressure-swirl atomizer // *Journal of Physics: Conference Series*. 2021. Vol. 1891. The International Conference on Aviation Motors (ICAM 2020; 18–21 May 2021, Moscow, Russia). No. 1: 012021. DOI: 10.1088/1742-6596/1891/1/012021
 19. Снегирев А.Ю. Высокопроизводительные вычисления в физике. Численное моделирование турбулентных течений: Учеб. пособие. – СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2008. – 143 с.
 20. van Oijen J.A., de Goey L.P.H. Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds // *Combustion Science and Technology*. 2000. Vol.161. No. 1, pp. 113–137. DOI: 10.1080/00102200008935814
 21. Бакланов А.В. Изменение температурного поля на выходе из многофорсуночной камеры сгорания при различных режимах работы двигателя // Вестник Московского авиационного института. 2024. Т. 31. № 2. С. 116–123. URL: <https://vestnikmai.ru/publications.php?ID=180654>
 22. Бакланов А.В. Обеспечение эффективности сжигания топлива в малоэмиссионной камере сгорания газотурбинной установки при различных климатических условиях // Вестник Московского авиационного института. 2022. Т. 29. № 1. С. 144–155. DOI: 10.34759/vst-2022-1-144-155
 23. Energico 18.2. User Guide. – San Diego: ANSYS Inc., 2017.
 24. Stagni A., Cuoci A., Frassoldati A. et al. A fully coupled, parallel approach for the post-processing of CFD data through reactor network analysis // *Computers & Chemical Engineering*. 2014. Vol. 60, pp. 197–212. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2013.09.002

References

1. Lukachev SV, Matveev SG, Orlov MYu. *Vybros kantserogenov pri szhiganii uglevodorodnykh topliv* (Carcinogen emissions from hydrocarbon fuel combustion). Samara: SSAU; 2007. 160 p.
2. Orlov MY, Zrelou VA, Orlova EV. Statistic data application for narrow-body aircraft engines combustion chambers preliminary design. *Aerospace MAI Journal*. 2022;29(4):151-160. DOI: 10.34759/vst-2022-4-151-160
3. Tkachenko AY. Working fluid mathematical model for the gas turbine engine thermo-gas-dynamic design. *Aerospace MAI Journal*. 2021;28(4):180-191. DOI: 10.34759/vst-2021-4-180-191
4. Koval' SN, Badernikov AV, Shmotin YN, Pyatunin KR. Digital twin technology application while gas turbine engines development. *Aerospace MAI Journal*. 2021;28(3):139-145. DOI: 10.34759/vst-2021-3-139-145
5. Wen Z, Yun S, Thomson MJ, Lightstone MF. Modeling soot formation in turbulent kerosene/air jet diffusion flames. *Combustion and Flame*. 2003;135(3):323-340. DOI: 10.1016/S0010-2180(03)00179-2
6. Griga AD, Ivanitsky MS. Determination of benz(a)pyrene in the flue gases of combustion chamber of gas turbine. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*. 2014;10(5):86-88.
7. Grigor'ev AV, Mitrofanov VA, Rudakov OA, Salivon ND. *Teoriya kamery sgoraniya* (Combustion chamber theory). St. Petersburg: Nauka; 2010. 227 p.
8. Pelevin VS, Aleksentsev AA, Filinov EP, Komisar YV. Impurities in aviation fuel effect on the working process parameters and effectiveness indicators of gas turbine engines and power plants. *Aerospace MAI Journal*. 2022;29(4):186-195. DOI: 10.34759/vst-2022-4-186-195
9. Kalyakina KA, Kalyakin AV, Faizullin RR, Egorov MA. Decarbonization of air transportation through the use of sustainable aviation fuels (SAF). *Nauchnyi vestnik UI GA*. 2022;(14):37-43.
10. Kozlov VE, Lebedev AB, Sekundov AN. et al. Application of reactor models to calculate emission characteristics of diffusion and homogeneous combustion chambers. In: *Trudy TsIAM. No. 1347 "Ekologicheskie problemy aviatsii". Sbornik statei*. Moscow: Torus Press; 2010. p. 321-338.
11. Kutlumukhamedov AR, Skiba DV, Bakirov FB. A review of works dedicated to the assessment of carbon monoxide emissions from gas turbine combustion chambers using reactor network models developed on the basis of the three-dimensional simulation results. *Vestnik UGATU*. 2022;26(1):69-80. DOI: 10.54708/19926502_2022_2619569
12. Chechet IV. *Metodika opredeleniya emissii kantserogennykh aromatischeskikh uglevodorodov kamerami sgoraniya gazoturbinykh dvigateley i ustanovok*. PhD. thesis. Samara University; 2018. 149 p.
13. Xin S, Wang W, Yang F. et al. Soot and PAH formation in laminar diffusion flames of RP-3 jet kerosene and its surrogates at preheat temperature. *Fuel*. 2024;361:130735. DOI: 10.1016/j.fuel.2023.130735
14. Semenikhin AS, Idrisov DV, Chechet IV. et al. Kinetic model and kerosene surrogate for calculating the emission of carcinogenic hydrocarbons by gas turbine engines. *Vestnik Samarskogo universiteta. Aerokosmicheskaya tekhnika, tekhnologii i mashinostroenie*. 2022;21(3):58-68. DOI: 10.18287/2541-7533-2022-21-3-58-68
15. Kim D, Martz J, Violi A. A surrogate for emulating the physical and chemical properties of conventional jet fuel. *Combustion and Flame*. 2014;161(6):1489-1498. DOI: 10.1016/j.combustflame.2013.12.015
16. Matveev SG, Chechet IV, Abrashkin VYu, Semenov AV. Formation of cancerogenic pah in the turbulent diffusive flame. *Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra Rossiiskoi akademii nauk*. 2013;15 6-4):881-885.
17. *ANSYS Fluent 21.2 User Guide*. Canonsburg, PA: ANSYS Inc. 2021.
18. Gurakov NI, Morales MH, Zubrilin IA. et al. A study on the geometric characteristic influence on the liquid fuel flow in a three-way pressure-swirl atomizer. *Journal of Physics: Conference Series*. 2021. Vol. 1891. The International Conference on Aviation Motors (ICAM 2020; May 18-21, 2021; Moscow, Russia). No.1:012021. DOI: 10.1088/1742-6596/1891/1/012021
19. Snegirev AY. *Vysokoproizvoditel'nye vychisleniya v fizike. Chislennoe modelirovanie turbulentnykh techenii* (High performance computing in physics. Numerical modeling of turbulent flows), St. Petersburg: Politekhnikeskii universitet; 2008. 143 p.
20. Oijen JA, Goey LPH. Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds. *Combustion Science and Technology*. 2000;161(1):113-137. DOI: 10.1080/00102200008935814
21. Baklanov AV. Temperature Field Change at the Multi-Nozzle Combustion Chamber Outlet at Various Engine Operating Modes. *Aerospace MAI Journal*. 2024;31(2):116-123. URL: <https://vestnikmai.ru/publications.php?ID=180654>
22. Baklanov AV. Fuel combustion efficiency ensuring in low-emission combustion chamber of gas turbine engine under various climate conditions. *Aerospace MAI Journal*. 2022;29(1):144-155. DOI: 10.34759/vst-2022-1-144-155
23. *Energico 18.2. User Guide*. San Diego: ANSYS Inc; 2017.
24. Stagni A, Cuoci A, Frassoldati A. et al. A fully coupled, parallel approach for the post-processing of CFD data through reactor network analysis. *Computers & Chemical Engineering*. 2014;60:197-212. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2013.09.002

Статья поступила в редакцию 11.09.2024; одобрена после рецензирования 01.11.2024; принята к публикации 05.11.2024.
The article was submitted on 11.09.2024; approved after reviewing on 01.11.2024; accepted for publication on 05.11.2024.