

УДК 621.454

Сокращение механизмов реакций при моделировании высокотемпературных течений в соплах

Крюков В.Г.*, Абдуллин А.Л.**, Никандрова М.В.***, Исхакова Р.Л.****

Казанский Национальный Исследовательский Технический Университет,

Казань, ул. К. Маркса, 10, 420111, Россия

*e-mail: vkrioukov@mail.ru

**e-mail: ala2000@mail.ru

***e-mail: manivik@gmail.com

****e-mail: vkrujkov@kai.ru

Статья поступила 02.04.2019

Аннотация

Представлен алгоритм автоматизированного сокращения механизма рекомбинации продуктов сгорания в соплах ДЛА. Алгоритм включает метод DRGEP (распространение ошибок в прямо ориентированном графе) и метод зацепления с адаптивным порогом. Эта процедура была встроена в модель химически неравновесных течений в соплах, и сокращение механизма рекомбинации проводилось для течений продуктов сгорания топлив: «O₂ + керосин» и «N₂O₄ + C₂H₈N₂». В результате было достигнуто существенное сокращение исходного реакционного механизма при высокой точности прогнозирования характеристик течения.

Ключевые слова: сопло, химически неравновесные течения, механизм реакций, сокращение.

1. Введение

Моделирование высокотемпературных химически неравновесных течений в соплах ДЛА является традиционной задачей при проектировании этих агрегатов, и, в связи с поиском новых топливных композиций и разработкой новых конструктивных схем сопел, интерес к этой проблеме не ослабевает [1- 7]. Современные модели расчета таких течений базируются на детальной химической кинетике. Для этого формируется некоторый реакционный механизм, который включается, например, в обратную задачу сопла Лавалья, представленную в [8]. Однако формирование такого механизма является непростой задачей. К настоящему времени, например, для реагирующей среды $C + H + O + N$ (при $\alpha_{ок} \geq 0.6$ где $\alpha_{ок}$ - коэффициент избытка окислителя) выявлено более 200 элементарных реакций, которые, строго говоря, следует включить в реакционный механизм. Но большинство из этих реакций не оказывают никакого влияния на процесс рекомбинации продуктов сгорания в сопле. Поэтому появляется задача сокращения и обоснования механизма реакций.

Практически во всех известных работах по расчету химически неравновесных течений в соплах [9, 10, 11 и др.] для формирования такого механизма использовался экспертный подход, когда в результате:

- выполнения значительного числа модельных расчетов;
- анализа концентраций веществ и скоростей реакций;
- сравнения схем превращения веществ.

Опытными специалистами формируется некоторый небольшой набор определяющих реакций, который позволяет прогнозировать характеристики течения с приемлемой точностью. Замечательным примером экспертного подхода является механизм реакций для моделирования течений в соплах реагирующей среды (C + H + O + N), созданный академиком Кондратьевым В.Н. с сотрудниками [12]. Этот механизм был применен Пирумовым У.Г. для расчета химически неравновесных течений продуктов сгорания широкого спектра топлив, представленных в справочнике [12, 13]. Однако, экспертный подход требует значительных временных затрат, и он выполняется только опытными специалистами.

Вместе с тем, к настоящему времени уже разработан ряд автоматизированных методов сокращения [14, 15, 16, 17] (автоматизированный подход) и, они уже широко применяются при расчете процессов горения в реакторах идеального смешения (РИС) и идеального вытеснения (РИВ). Но для моделирования течений в соплах этот подход еще не используется.

В связи с вышеизложенным задачами данной работы являются:

- разработка алгоритма и программного обеспечения автоматизированного сокращения механизма реакций, и включение его в модель расчета химически неравновесных течений в соплах;
- валидация этой разработки путем генерации сокращенных механизмов рекомбинации для продуктов сгорания некоторых известных топлив.

2. Алгоритм сокращения реакционного механизма

Современные процедуры сокращения механизмов используют следующие положения:

- сначала выбирается базовая модель горения (РИВ, РИС, фронт пламени, и т.п.), для которой будет выполняться сокращение механизма, т.к. для разных моделей получаются разные сокращенные механизмы;
- изначально должен быть сформирован избыточный механизм реакций (или C -механизм), который необходимо сократить, а также устанавливается область параметров, охватываемая искомым сокращенным механизмом;
- механизм, сокращенный для одной точки этих параметров, называется локальным (L -механизм), а для всей области изменения параметров - глобальным (G -механизм), обычно он формируется в ходе объединения L -механизмов;
- задается набор целевых веществ, которые в ходе сокращения не могут удаляться, из механизма в отличие от остальных (зондируемых) веществ;

- сокращенный механизм будет состоять только из набора элементарных реакций, а получение на основе этого набора каких либо суммарных реакций является отдельной задачей;

- процедура сокращения включает, как правило, несколько методов сокращения, и для каждого такого метода задается показатель сокращения (порог); чем он выше, тем значительнее сокращается исходный механизм, но тем больше получается погрешность, вызванная его сокращением.

Для сопел ДЛА задача сокращения механизма имеет следующие особенности:

1) На вход сопла подаются высокотемпературные химически равновесные продукты сгорания. В сопле Лавалья тепловая энергия диссоциированного рабочего тела частично превращается в механическую энергию газовой струи, а параметры состояния P , T (давление и температура) изменяются за очень короткое время ($10^{-4} \dots 10^{-5}$ сек). Поэтому состав реагирующей системы не успевает «подстраиваться» к этим изменениям, т.е. течение является химически неравновесным, и для его описания необходим некоторый набор реакций рекомбинации. На рис. 1 показано принципиальное изменение основных характеристик потока по длине сопла, где: 1- камера сгорания; 2 - сопло; oc – сечение входа; M – минимальное сечение (горло); a – срез сопла

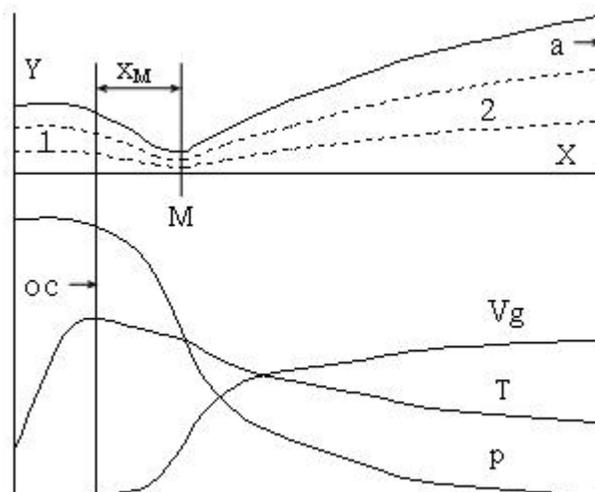


Рис 1 – Характерное изменение скорости (V_g), температуры (T) и давления (P) по длине сопла

2) Важнейшей характеристикой неравновесного течения является коэффициент потерь удельного импульса из-за химической неравновесности (ξ_{xn}), и при сокращении механизма реакций точность расчета этого коэффициента должна оставаться высокой.

Для его определения необходимо вычислить: идеальный удельный импульс ($I_{yd}^{ид}$) химически равновесного течения (см. например [18]) и удельный импульс (I_{yd}^{xn}) химически неравновесного течения (например [19]). Тогда этот коэффициент вычисляется по формуле:

$$\xi_{xn} = \frac{I_{yd}^{ид} - I_{yd}^{xn}}{I_{yd}^{ид}} \quad (1)$$

Для решения задачи сокращения нами была сформирована 2-х этапная процедура, которая включает:

- метод DRGEP (Directed Relation Graph Error Propagation), и
- метод зацепления с адаптивным порогом.

Метод DRGEP [15] (первый этап) ориентирован на поиск и удаление из сокращаемого реакционного механизма только веществ вместе с включающими их реакциями. В этом методе реакционный механизм представляется в виде ориентированного графа, в котором вершины соответствуют веществам, а дуги отражают «силы связи» между ними. Если между целевым и зондируемым веществами сила связи значительна, то вещество включается в сокращаемый механизм. Остальные зондируемые вещества (вместе с соответствующими реакциями) удаляются. Подробности применяемой нами версии метода DRGEP изложены в работе [20].

Но после первого этапа сокращения в механизме могут оставаться еще ряд малозначимых реакций. Такие реакции удаляются методом зацепления с адаптивным порогом [20, 21] (второй этап). Здесь реакции, имеющие скорости меньше некоторого порога удаляются из механизма, и величина этого порога вычисляется с учетом силы связи, определяемой в методе DRGEP. Подробно второй этап изложен в работе [20].

Отметим, что созданная комбинированная процедура требует небольшого объема вычислений и достаточно эффективно сокращает исходный механизм. Эта процедура включается в программу расчета химически неравновесных течений в сопле и по ходу решения (при перевычислении якобиана) из *C*-механизма генерируются

сокращенные механизмы. В конце расчета они объединяются, и для заданной точки набора параметров получается L –механизм.

3. Сокращение механизмов реакций для высокотемпературных течений продуктов сгорания топлив «Керосин + O_2 » и « N_2O_4 + $C_2H_8N_2$ »

По предложенной процедуре были выполнены расчеты по сокращению механизмов реакций для реагирующих течений в профилированных соплах для следующей области изменения параметров:

$$\alpha_{ок} = 0.7 \dots 1.2; P_{oc} = 20 \dots 100 \text{ атм.}; r_m = 0.006 \dots 0.06 \text{ м}, \quad (2)$$

(где $\alpha_{ок}$ - коэффициент избытка окислителя; P_{oc} – давление на входе в сопло; r_m – радиус минимального сечения сопла) и сокращенный G - механизм будет охватывать указанную область. С изменением размеров сопла форма его контура не меняется, а геометрическая степень расширения по площади задается постоянной $f_a = (r_a/r_m)^2 = 50$ (r_a – радиус среза сопла).

Продукты сгорания топлива «Керосин + O_2 »

Для этого примера сформированный нами исходный механизм (Таблица 1) включал 16 веществ и 47 реакций, заимствованных из работ [22; 23]. Целевыми веществами считаются: CO_2 , O_2 , H_2O , CO .

Таблица 1.

Исходный механизм (С- механизм) реакций рекомбинации для продуктов сгорания
топлива «Керосин + O₂»

№(С)	Реакция	№(С)	Реакция	№(С)	Реакция
1	O ₂ +H ₂ O=HO ₂ +OH	17	CH+O ₂ =CO+OH	33	CH ₂ +O=CO+2H
2	O ₂ +H ₂ =2OH	18	CH+O ₂ =HCO+O	34	CH ₂ +OH=H+H ₂ CO
3	H ₂ +OH=H ₂ O+H	19	CH ₄ +O=CH ₂ +H ₂ O	35	CH ₂ +O ₂ =OH+HCO
4	O+H ₂ =OH+H	20	O ₂ +CH ₄ =CH ₃ +HO ₂	36	CH ₂ +O ₂ =H ₂ +CO ₂
5	H+O ₂ =OH+O	21	CH ₄ +M=CH ₃ +H+M	37	OH+CO ₂ =O ₂ +HCO
6	2OH=H ₂ O+O	22	CH ₄ +H=CH ₃ +H ₂	38	HCO +OH=CO+H ₂ O
7	2H+M=H ₂ +M	23	CH ₄ +O=CH ₃ +OH	39	HCO+M =H +CO+M
8	2O+M=O ₂ +M	24	OH+CH ₄ =H ₂ O+CH ₃	40	HCO+H =CO+H ₂
9	H+M+OH=H ₂ O+M	25	OH+CH ₃ =H ₂ O+CH ₂	41	HCO+ O =CO+ OH
10	O+H+M=OH+M	26	CH ₃ +H ₂ CO=CH ₄ +HCO	42	HCO +O ₂ =CO+HO ₂
11	CO+O ₂ =CO ₂ +O	27	CH ₃ +O ₂ =OH+H ₂ CO	43	H ₂ CO+M=HCO+H+M
12	CO+OH=CO ₂ +H	28	CH ₃ +O ₂ =HCO+H ₂ O	44	H ₂ CO+OH=HCO+H ₂ O
13	CO+O+M=CO ₂ +M	29	CH ₃ +O=H ₂ CO+H	45	H ₂ CO+H=HCO+H ₂
14	CO ₂ +H ₂ =OH+HCO	30	CH ₂ +OH=CH+H ₂ O	46	H ₂ CO+O=HCO +OH
15	CO ₂ +H=O+HCO	31	CH ₂ +O=CH+OH	47	H ₂ CO+O ₂ =HCO+HO ₂
16	CH ₂ +H=CH+H ₂	32	CH ₂ +O=HCO+H		

Сначала был рассмотрен режим течения с параметрами $\alpha_{ox} = 1.0$; $P_{oc} = 20$ атм.; $r_m = 0.006$ м, (базовый режим), когда наиболее явно проявляются химически неравновесные эффекты, и по нему (см. табл. 2) были установлены значения порогов ζ_d (DRGEP- метод), ζ_{az} (метод зацепления) для всей области действия G- механизма (2).

Таблица 2

Размеры сокращенных механизмов и характеристики течения на срезе сопла в зависимости от значения порогов ζ_d , ζ_{az} (при $\zeta_d = \zeta_{az} = \zeta_L$). (Концентрации веществ CO_2 , O_2 , H_2O , CO даны в мольных долях; $B_i(L)$, $R_j(L)$ – число веществ и реакций в L – механизмах)

Механизм	$B_i(L)$	$R_j(L)$	$T_a(^{\circ}\text{K})$	CO_2	O_2	H_2O	CO	$\xi_{xH}(\%)$
C -механизм	16	47	1515	0.2875	0.0933	0.3447	0.1577	5.213
$\zeta_L = 0.01$	9	13	1515	0.2875	0.0933	0.3447	0.1577	5.215
$\zeta_L = 0.02$	9	13	1515	0.2875	0.0933	0.3447	0.1577	5.215
$\zeta_L = 0.04$	8	10	1501	0.2859	0.0941	0.3435	0.1583	5.329
$\zeta_L = 0.08$	8	10	1501	0.2859	0.0941	0.3435	0.1583	5.329

Как видно из этой таблицы существенное сокращение исходного механизма достигается уже при малом пороге $\zeta_L = 0.01$, и в L -механизме остается 9 веществ:



и 13 реакций при очень незначительных погрешностях сокращения. В частности для выходного сечения сопла имеем относительные погрешности: по температуре ($\delta_T \leq 10^{-4}$); по коэффициенту ξ_{xH} ($\delta_{xH} \leq 2 \cdot 10^{-4}$); по целевым веществам ($\delta_i \leq 10^{-4}$). Такое значительное сокращение вызвано, в основном, наличием в C -механизме четырех-атомных веществ и связанных с ними радикалов. Эти вещества при высоких температурах становятся неустойчивыми, поэтому содержатся в рабочем теле в мизерных концентрациях и не влияют на содержание целевых веществ. В результате на первом шаге процедуры сокращения (метод DRGEP) были удалены 6 веществ (CH_4 ,

NO₂, CH, CH₂, CH₃, H₂CO) и связанные с ними 29 реакций. Еще пять маловлияющих реакций были удалены на этапе зацепления.

При пороге $\zeta_L = 0.02$ генерируется такой же сокращенный механизм и поэтому погрешности характеристик рабочего тела на выходе сопла остаются такими же незначительными. По длине сопла они также почти незаметны, как можно видеть на рис. 2, где показано изменение состава продуктов сгорания при их расчете по *C*- и *L*-механизмам.

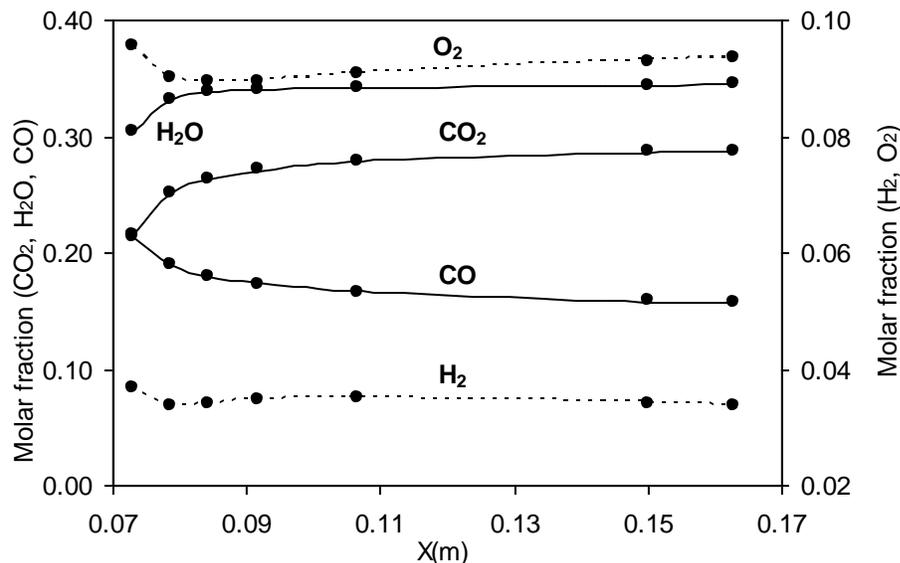


Рис.2. Изменение состава и температуры по длине сопла на базовом режиме для исходного и сокращенного ($\zeta_L = 0.02$) механизмов; топливо «Керосин + O₂»

При пороге $\zeta_L = 0.04$ на базовом режиме генерируется сокращенный механизм, содержащий 8 веществ и 10 реакций (удаляется радикал HCO и 3 реакции). Его удаление приводит к некоторому расхождению между результатами расчетов по *C*- и

L - механизмам в частности: $\delta_T \approx 0.01$; $\delta_{xH} \approx 0.02$; $\delta_t \approx 0.01$. Поэтому при генерации L - механизмов для других режимов неравновесного течения был установлен порог $\zeta_L = 0.02$. Затем в области (2) было выбрано около 40 точек $\{\alpha_{ок}; P_{oc}; r_m\}$, для каждой из которых был выполнен расчет течения и сгенерирован L – механизм.

Некоторые результаты по таким механизмам показаны в таблице 3, где $T_a(C)$, $T_a(L)$, $\xi_{xH}(C)$, $\xi_{xH}(L)$ – характеристики на выходе из сопла, полученные по C - и L - механизмам. В столбцах 2-7 даны характеристики L – механизмов в точках $P_{oc} = 20$ атм.; $r_m = 0.006$ м в диапазоне: $\alpha_{ок} = 0.7 \dots 1.2$ с шагом $\Delta\alpha_{ок} = 0.1$, а столбцах 8 и 9 описаны такие же характеристики в точках:

$$\{\alpha_{ок} = 1.0 ; P_{oc} = 100; r_m = 0.006\text{м}\} \quad (4)$$

$$\{\alpha_{ок} = 1.0 ; P_{oc} = 100; r_m = 0.06\text{м}\} \quad (5)$$

Таблица 3

Сравнение характеристик течения для продуктов сгорания топлива «Керосин + O_2 »

при использовании полного и сокращенных (при $\zeta_L = 0.02$) механизмов

	$P_{oc} = 20$ атм.; $r_m = 0.006$ м						(4)	(5)
α_{ox}	0.7	0.8	0.9	1.0	1.1	1.2	1.0	1.0
$B_i(L)$	9	9	9	9	9	9	9	9
$R_j(L)$	11	12	13	13	14	12	13	11
$T_a(C)$ °К	1258	1436	1509	1515	1493	1461	1850	2055
$T_a(L)$ °К	1258	1435	1510	1515	1493	1461	1851	2055
$\xi_{xH}(C)$ %	2.372	4.119	5.037	5.213	5.310	5.335	2.362	1.080
$\xi_{xH}(L)$ %	2.383	4.163	4.983	5.215	5.261	5.354	2.369	1.080

Как видно, каждый L – механизм содержит 9 веществ, включенных в набор (3), но с различным числом реакций (от 11 до 14 реакций), что вызвано изменением роли некоторых из них с последующим их удалением (или удержанием) на шаге зацепления. Температура на срезе сопла $T_a(L)$ прогнозируется практически без ошибок. Но появляются небольшие погрешности по потерям удельного импульса. Максимальное рассогласование по этому показателю между C - и L – механизмами составляет по удельному импульсу ≈ 1.5 м/с. Объединяя все сгенерированные L – механизмы, получим «глобальный» сокращенный механизм (таблица 4) для всей охватываемой области (2).

Таблица 4

Сокращенный G - механизм для продуктов сгорания топлива «Керосин + O_2 » для области (2) изменения параметров $\alpha_{ок}$, $P_{ос}$, r_m

№(С)	Реакция	№(С)	Реакция	№(С)	Реакция
3	$H_2+OH=H_2O+H$	8	$2O+M=O_2+M$	13	$CO+O+M=CO_2+M$
4	$O+H_2=OH+H$	9	$H+M+OH=H_2O+M$	14	$CO_2+H_2=OH+HCO$
5	$H+O_2=OH+O$	10	$O+H+M=OH+M$	15	$CO_2+H=O+HCO$
6	$2OH=H_2O+O$	11	$CO+O_2=CO_2+O$	39	$HCO+M=H+CO+M$
7	$2H+M=H_2+M$	12	$CO+OH=CO_2+H$	40	$HCO+H=CO+H_2$

В соответствии с известным правилом: «Объем вычислений, пропорционален числу реакций и кубу числа веществ», можно получить оценку для отношения объемов расчетов по C - и G – механизмам:

$$\frac{V(C)}{V(L)} = \left(\frac{47}{15}\right) \times \left(\frac{16}{9}\right)^3 \approx 20 \quad (6)$$

Полученный результат для одномерных задач не имеет особого значения, т.к. такие задачи на персональных компьютерах решаются за несколько секунд. Но расчет многомерных реагирующих течений может занимать много часов и тогда применение созданного G – механизма позволит существенно сократить время вычислений.

В) Топливо « $N_2O_4 + C_2H_8N_2$ » Данная реагирующая система является более сложной, нежели в предыдущем примере, т.к. при высоких температурах азотосодержащие вещества будут активно участвовать в химических реакциях. Поэтому к целевым веществам был добавлен молекулярный азот « N_2 ». В сформированный нами исходный механизм было включено 26 веществ и 82 реакции, заимствованные из работ [22, 23]. Цель численных исследований заключалась в создании сокращенного G - механизма для той же самой области (2) изменения параметров $\alpha_{ок}$, $P_{ос}$, r_m .

В таблице 5 показаны результаты сокращения C -механизма для базового режима ($\alpha_{ок} = 1.0$; $P_{ос} = 20$ атм.; $r_m = 0.006$ м) в зависимости от значения порогов ζ_L . Как видно уже при $\zeta_L = 0.01$ механизм сокращается до 15 веществ и 26 реакций при незначительных относительных ошибках по температуре ($\delta_T \approx 0.001$), по целевым веществам ($\delta_i \approx 0.01$), по потерям удельного импульса ($\delta_{хн} \approx 0.01$).

Таблица 5

Размеры сокращенных механизмов для базового режима и характеристики течения на срезе сопла в зависимости от значения порогов $\zeta_L = \zeta_d = \zeta_{az}$. Топливо « $N_2O_4 + C_2H_8N_2$ »

Механизм	$B_i(L)$	$R_j(L)$	$T_a(K)$	CO ₂	O ₂	H ₂ O	CO	NO	$\xi_{xH}(\%)$
C-механизм	26	82	1187	0.1436	0.0386	0.3731	0.0637	0.0177	6.002
$\zeta_L=0.01$	15	26	1188	0.1439	0.0383	0.3736	0.0635	0.0178	5.932
$\zeta_L=0.02$	14	23	1187	0.1436	0.0386	0.3731	0.0637	0.0177	6.013
$\zeta_L=0.03$	13	17	1181	0.1429	0.0388	0.3730	0.0642	0.0177	6.026
$\zeta_L=0.04$	12	14	1179	0.1425	0.0392	0.3722	0.0644	0.0178	6.131

Известно, что при увеличении порогов имеется общий тренд возрастания расхождений между результатами, получаемыми по C- и L – механизмам. Но при $\zeta_L = 0.02$ эти ошибки становятся очень малыми ($\delta_T \approx 0.01\%$; $\delta_{dg} \approx 0.01\%$; $\delta_t \approx 0.01\%$) хотя размер L – механизма уменьшается. В ряде работ, например [14], отмечается, что такая флуктуация возможна. При генерации L – механизма такие флуктуации встречаются редко, и как видно из таблицы 5 при дальнейшем увеличении порогов погрешности сокращенного механизма нарастают. Можно отметить, что даже при $\zeta_L = 0.04$ расхождения между результатами, получаемыми по C- и L – механизмам являются незначительными: по температуре ($\delta_T \approx 0.01$), по целевым веществам ($\delta_i \approx 0.02$), по потерям из-за химической неравновесности ($\delta_{xH} \approx 0.02$), что соответствует ошибке по удельному импульсу ≈ 4 м/сек.

По результатам расчетов для базового режима (см. табл. 5) были установлены пороги $\zeta_L = \zeta_d = \zeta_{a0} = 0.02$ для всей области действия G- механизма. Далее для

формирования этого механизма в области (2) было выбрано около 40 точек $\{\alpha_{ок}; P_{ос}; r_m\}$, для каждой из которых был сгенерирован L – механизм. Некоторые результаты показаны в таблице 6, которая по структуре соответствует таблице 3. Максимальный по размеру L – механизм генерировался в точке (4). Он включает 24 реакции и 15 веществ:

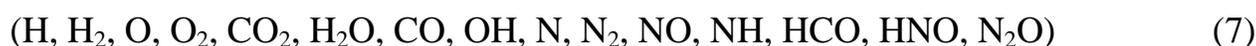


Таблица 6

Сравнение характеристик течения для продуктов сгорания топлива « $N_2O_4 + C_2H_8N_2$ »

при использовании полного и сокращенных ($\zeta_L = 0.02$) механизмов

	$P_{ос} = 20$ атм.; $r_m = 0.006$ м						(4)	(5)
$\alpha_{ок}$	0.7	0.8	0.9	1.0	1.1	1.2	1.0	1.0
$B_i(L)$	14	14	14	14	14	13	15	15
$R_j(L)$	22	24	21	23	22	22	24	22
$T_a(C)$	938	1074	1152	1187	1150	1106	1369	1486
$T_a(L)$	938	1072	1152	1187	1150	1102	1369	1485
$\xi_{xH}(C)$	1.778	2.928	4.602	6.002	5.493	5.066	3.112	1.670
$\xi_{xH}(L)$	1.771	2.929	4.650	6.013	5.508	5.146	3.078	1.710

Объединяя все полученные L – механизмы был сформирован G - механизм, включающий вещества (7) и 27 реакций, приведенных в таблице 7. Он содержит на 3 реакции больше чем максимальный L – механизм, т.к. малозначимые для него реакции могут быть чувствительными для других локальных механизмов.

Таблица 7

Сокращенный G- механизм для продуктов сгорания топлива « $N_2O_4 + C_2H_8N_2$ » для области (2) изменения параметров $\alpha_{ок}$, $P_{ос}$, r_m

Реакция	Реакция	Реакция
$H_2+OH=H_2O+H$	$CO_2+H_2=OH+HCO$	$HNO+OH=NO+H_2O$
$O+H_2=OH+H$	$CO_2+H=O+HCO$	$N+OH=NO+H$
$H+O_2=OH+O$	$HCO+M=H+CO+M$	$N_2O+H=N_2+OH$
$2OH=H_2O+O$	$HCO+H=CO+H_2$	$HNO+H=H_2+NO$
$2H+M=H_2+M$	$CO+O+M=CO_2+M$	$NH+NO=N_2O+H$
$2O+M=O_2+M$	$N+NO=N_2+O$	$NH+O_2=HNO+O$
$H+M+OH=H_2O+M$	$N+O_2=NO+O$	$HNO+M=H+NO+M$
$O+H+M=OH+M$	$NH+H=N+H_2$	$NH+OH=N+H_2O$
$CO+OH=CO_2+H$	$N_2O+M=N_2+O+M$	$NH+OH=HNO+H$

Заключение

1. В задачах расчета химически неравновесных процессов в соплах ДЛА для обоснования реакционных механизмов обычно применяется экспертный подход. Однако этот подход требует значительных временных затрат, и он выполняется только опытными специалистами. В настоящей работе для решения этой задачи применяется подход автоматизированного обоснования (сокращения) реакционных механизмов. В рамках этого подхода нами предлагается процедура генерации сокращенного механизма, обеспечивающего контролируемую ошибку в прогнозе характеристик течения.

2. Эта процедура, включающая методы DRGEP и зацепления и встроенная в программный комплекс расчета химически- неравновесных процессов, требует малого объема вычислений и позволяет существенно сократить исходный механизм.

3. Были выполнены исследования по формированию сокращенных механизмов в широкой области изменения параметров течения в соплах ДЛА: $\alpha_{ок} = 0.7 \dots 1.2$; $P_{oc} = 20 \dots 100$ атм.; $r_m = 0.006 \dots 0.06$ м, при приемлемой ошибке в прогнозе характеристик течения. Для двух известных топлив были получены следующие результаты:

- реакционный механизм рабочего тела топлива «Керосин + O₂» был сокращен с 47 реакций и 16 веществ до 15 реакций и 9 веществ;

- реакционный механизм рабочего тела топлива «N₂O₄ + C₂H₈N₂» был сокращен с 82 реакций и 26 веществ до 27 реакций и 15 веществ.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда
Фундаментальных Исследований и правительства Республики Татарстан
(Грант № НК №15-48-02454 /2017).*

Библиографический список

1. Law C.K. Fuel Options for Next-Generation Chemical Propulsion // AIAA Journal, 2012, vol. 50, no. 1, pp. 19 - 36.

2. Barbour E.A. and Hanson R.K. Chemical nonequilibrium, heat transfer, and friction in a detonation tube with nozzles // Journal of Propulsion and Power, 2010, vol. 26, no. 2, pp. 230 - 239.
3. Powers J.M. and Paolucci S. Accurate Spatial Resolution Estimates for Reactive Supersonic Flow with Detailed Chemistry // AIAA Journal, 2005, vol. 43, no. 5, pp. 1088 - 1099.
4. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц бора с воздухом // Труды МАИ. 2016. № 91. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=75562>
5. Корепанов М.А. Математическое моделирование химически реагирующих течений // Химическая физика и мезоскопия. 2008. Т. 10. № 3. С. 268 - 279.
6. Назырова Р.Р. Вариационное исчисление как фундамент исследования течения среды при учете уравнения состояния реальных газов. Труды МАИ. 2017. № 92. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=77448>
7. Sabirzyanov A.N., Glazunov A.I., Kirillova A.N., Titov K.S. Simulation of a Rocket Engine Nozzle Discharge Coefficient // Russian Aeronautics, 2018, vol. 61, issue 2.1, pp. 257 - 264
8. Пирумов У.Г., Росляков Г.С. Газовая динамика сопел. - М.: Наука. Главное издательство физико-математической литературы, 1990. - 368 с.

9. Janbozorgi M. and Metgalchi H. Rate-controlled constrained-equilibrium modeling of H/O reacting nozzle flow // Journal of Propulsion and Power, 2012, vol. 28, no. 4, pp. 677 - 684.
10. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование химически неравновесного течения в сопле жидкостного ракетного двигателя // Вестник Московского авиационного института. 2013. Т. 20. № 2. С. 90 - 97.
11. Силютин М.В. Шустов А.С. Прикладные аспекты использования методики численного термогазодинамического расчета ЖРДМТ с учетом неидеального протекания рабочих процессов в камере сгорания. // Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета. 2011. Т. 27. № 3. С. 71 - 77.
12. Алемасов В.Е., Дрегалин А.Ф., Тишин А.П. и др. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания: Справочник. - М.: ВИНТИ, 1972. Т. 2 - 489 с., 1973. Т. 4. - 527 с.
13. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочник. В 4-х томах. - 3-е изд., перераб. и расширен. - М.: Наука, 1978. Т. 1. Кн. 1 - 495 с., кн. 2 - 327 с.
14. Nagy T., Turanyi T. Reduction of very large reaction mechanisms using methods based on simulation error minimization // Combustion and Flame, 2009, vol. 156, pp. 417 - 428.

15. Pepiot-Desjardins P., Pitsch H. An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms // *Combustion and Flame*, 2008, vol. 154, pp. 67 - 81.
16. Tianfeeng L., Yiguang J., Chung K.L. Complex CSP for chemistry reduction and analysis // *Combustion and Flame*, 2001, vol. 126, pp. 1445 - 1455.
17. Лебедев А.В., Окунь М.В., Баранов А.Е., Деминский М.А. Упрощение кинетических механизмов физико-химических процессов на основе комбинированных математических методов // *Химическая физика и мезоскопия*. 2011. Т. 13. № 1. С. 43 - 52.
18. Алемасов В.Е., Дрегалин А.Ф., Черенков А.С. Основы теории физико-химических процессов в тепловых двигателях и энергоустановках. - М.: Химия, 2000. - 328 с.
19. Крюков В.Г., Абдуллин А.Л., Демин А.В., Сафиуллин И.И. Сравнение явных и неявных разностных схем расчета химически неравновесных процессов в соплах // *Труды МАИ*. 2017. № 92. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=76848>
20. Spilimbergo P., Krioukov V.G., Nikandrova M.V. Reduction of reaction mechanism by methods of DRGEP and of engagement // *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics. XXXVII Congresso Nacional de Matemática Aplicada Computacional, São José dos Campos –SP- Brasil.*, 2017, pp. 1 – 7.
21. Крюков В.Г., Абдуллин А.Л., Сафиуллин И.И., Исхакова Р.Л. Сокращение механизмов реакций комбинацией методов DRGEP и зацепления // *Материалы XX*

Международной конференции по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам. ВМСППС'2017 (Алушта, 24-31 мая 2017). – М.: Изд-во МАИ, С. 483 – 485.

22. Кондратьев В.Н. Константы скорости газозных реакций. - М.: Наука, 1974. - 512 с.

23. Glarborg P., Miller J.A., Kee R.J. Kinetic modeling and sensitivity analysis of nitrogen oxide formation in well-stirred reactors // Combustion and Flame, 1986, vol. 65, pp. 177 - 202.