

## **Вычислительный алгоритм расчета состава продуктов сгорания углеводородных топлив при наличии конденсированной фазы**

**Зыонг Минь Дык\*, Гидаспов В.Ю.\*\***

*Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), МАИ, Волоколамское шоссе, 4, Москва, А-80, ГСП-3, 125993, Россия*

*\*e-mail: [dmd.lqd@gmail.com](mailto:dmd.lqd@gmail.com)*

*\*\*e-mail: [gidasпов@mai.ru](mailto:gidasпов@mai.ru)*

*Статья поступила 15.05.2020*

### **Аннотация**

В данной работе описан вычислительный алгоритм, позволяющий рассчитывать равновесный состав продуктов сгорания углеводородных топлив при наличии конденсированных компонентов. Приведены особенности реализации алгоритма. Проведено сравнение результатов численного моделирования стационарного равновесного течения продуктов сгорания смеси керосина с воздухом в сопле Лаваля со справочными данными. Исследовано влияние давления на состав продуктов сгорания при избытке горючего. Расчетным путем получено, что зависимость концентрации сажи от давления качественно меняется при изменении коэффициента избытка воздуха.

**Ключевые слова:** физическая газовая динамика, термодинамическое моделирование, энергетическая установка, сгорание углеводородного топлива.

## Введение

Углеводородные соединения в качестве топлива широко применяются в современных высокоэнергетических установках [1-5]. Рассмотрение совокупности физико-химических, тепло-массообменных и термогазодинамических процессов при горении топлива с образованием конденсированных частиц приводит к значительным вычислительным трудностям [6-8]. В связи с этим на практике часто используются термодинамические методы моделирования [6-22]. Они предполагают, что рабочее тело в процессе горения образует замкнутую, изолированную систему, в которой установилось локальное термодинамическое равновесие. В настоящее время для отыскания термодинамического равновесия используются численные методы и вычислительные алгоритмы, основанные на поиске экстремума термодинамических потенциалов [8-13].

## Постановка задачи

Смесь продуктов сгорания рассмотрена как изолированная система совершенного газа без энергетического взаимодействия и обмена массы с окружающей средой. В состав продуктов сгорания углеводородного топлива в воздухе входят различные соединения химических элементов  $C$ ,  $H$ ,  $O$ ,  $N$ ,  $Ar$  в газообразном и конденсированном состояниях. Содержание компонентов газовой фазы ( $i=1,2,\dots,N$ ) и конденсированных фаз ( $l=N+1,N+2,\dots,N+L$ ), выраженные в молях на единицу массы обозначены  $\gamma_i$ .

Из второго закона термодинамики следует, что в состоянии равновесия энтропия изолированной системы достигает максимума [6]

$$S(U, v, \vec{\gamma}) \rightarrow \max_{\vec{\gamma}} \quad (1)$$

при соблюдении условий постоянства объема  $dv = 0$  и внутренней энергии  $dU = 0$ .

При решении задачи определения максимума энтропии должно выполняться условие сохранения химических элементов:

$$\sum_{i=1}^{N+L} A_K^i \gamma_i = \gamma_K^0, \quad K = 1, \dots, N_e, \quad \gamma_i > 0, i = 1, \dots, N, \quad \gamma_i \geq 0, i = N+1, \dots, N+L \quad (2)$$

Здесь  $A_k^i$  - матрица состава, количество атомов  $k$ -ого элемента в  $i$ -ом веществе;  $\gamma_k^0$  - заданная мольно-массовая концентрация  $k$ -ого элемента. Необходимо отметить, что максимум (1) может достигаться на границе области допустимых значений концентраций, в точках, в которых концентрации конденсированной фазы строго равны нулю.

При помощи метода неопределенных множителей Лагранжа задачу отыскания координат условного экстремума можно свести к решению системы нелинейных уравнений и неравенств [8-10, 19-21]. Функция Лагранжа имеет следующий вид [8]:

$$\Lambda = S + \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K \left( \sum_{i=1}^{N+L} A_K^i \gamma_i - \gamma_K^0 \right), \quad \gamma_i > 0, i = 1, \dots, N, \quad \gamma_i \geq 0, i = N+1, \dots, N+L, \quad (3)$$

где  $\lambda_k$  - неопределенные множители функции Лагранжа. Продифференцировав уравнение (3) по  $\gamma_i$  с учетом фундаментального соотношения Гиббса [6] и вогнутости функции энтропии в координатах  $(U, v, \vec{\gamma})$  получим:

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial \gamma_i} = -\frac{\mu_i}{T} + \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^i = 0, \quad i = 1, \dots, N \quad (4)$$

и

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial \gamma_l} = -\frac{\mu_l}{T} + \sum_{k=1}^{N_e} \lambda_k'' A_k^l \leq 0, l = N+1, \dots, N+L \quad (5)$$

Здесь  $\mu_i$  - химический потенциал  $i$ -ого вещества. Причем в (5) выполняется строгое равенство в случае, когда конденсированное вещество присутствует в равновесном составе и неравенство, если его концентрация равна нулю. Для удобства система (4)-(5) переписывается в виде:

$$\mu_i - \sum_{k=1}^{N_e} \lambda_k A_k^i = 0, i = 1, \dots, N \quad (6)$$

и

$$\gamma_l \left( \mu_l - \sum_{k=1}^{N_e} \lambda_k A_k^l \right) = 0, l = N+1, \dots, N+L \quad (7)$$

Неизвестными в системе системы уравнений (6), (7) являются концентрации веществ  $\gamma_i, i=1, \dots, N+L$  и множители Лагранжа  $\lambda_k, k=1, \dots, N_e$ .

Уравнения (6)-(7) являются универсальными и могут быть использованы для расчета равновесного состава произвольной термодинамической системы [8-11,19-21], независимо от того, какой парой термодинамических параметров характеризуется равновесное состояние и совместно с (2) образуют систему из  $N+L+N_e$  уравнений для решения которой дополнительно должно быть задано 2 термодинамических параметра. Для расчета состава продуктов сгорания углеводородных топлив, удобно задавать давление  $p$ , при котором осуществляется процесс сгорания и коэффициент избытка окислителя воздуха  $\alpha$ , по которым можно найти суммарную энтальпию системы  $H_k$ .

### Построение математической модели для решения поставленной задачи

Будем считать, что газовая фаза всегда присутствует в системе, и представляет собой смесь совершенных газов, термодинамические свойства конденсированной фазы зависят только от температуры и, что занимаемым ей объемом можно пренебречь, то выражение для потенциала Гиббса такой системы имеет вид [22]:

$$G(p, T, \vec{\gamma}) = \sum_{i=1}^N \gamma_i \left( RT \ln \frac{p \gamma_i}{P_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j} + G_i^0(T) \right) + \sum_{l=N+1}^{N+L} \gamma_l G_l^0(T) \quad (8)$$

Здесь  $G_i^0(T)$ ,  $i = 1, \dots, N + L$  - известная функция, температурная часть потенциала Гиббса  $i$ -ого компонента [22],  $P_0 = 101325$  Па,  $T_0 = 298,15$  К;  $R = 8,3144$  Дж/моль/К – универсальная газовая постоянная. Соответствующие (8) термическое и калорическое уравнения состояния:

$$v = \left( \frac{\partial G}{\partial p} \right)_{T, \vec{\gamma}} = RT \sum_{i=1}^N \gamma_i / p, \quad (9)$$

$$U = G - p \left( \frac{\partial G}{\partial p} \right)_{T, \vec{\gamma}} - T \left( \frac{\partial G}{\partial T} \right)_{p, \vec{\gamma}} = \sum_{i=1}^{N+L} \gamma_i \left( G_i^0(T) - T \frac{dG_i^0(T)}{dT} \right) + RT \sum_{i=1}^N \gamma_i \quad (10)$$

Здесь  $v$  – удельный объем. Тогда уравнения (6) и (7) могут быть записаны:

$$R \ln \frac{RT \gamma_i}{P_0 v} + \frac{G_i^0(T)}{T} - \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^i = 0, \quad i = 1, \dots, N \quad (11)$$

$$\left( \frac{G_l^0(T)}{T} - \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^l \right) \gamma_l = 0, \quad l = N + 1, \dots, N + L \quad (12)$$

Наличие в равновесном составе конденсированной фазы существенно осложняет разработку эффективного вычислительного алгоритма для расчета равновесного состава. В работе предлагается осуществлять расчет в два этапа.

На первом этапе воспользоваться методом, больших молекул, предложенный В.А. Худяковым [7]. В соответствии с которым конденсированная фаза моделируется газом, каждая молекула которого включает  $B$  молекул вещества, из которых состоит конденсированная фаза, с соответствующим изменением термодинамических свойств и матрицы состава и, соответственно, уравнения (12) заменяются на соотношения, аналогичные (11).

$$R \ln \frac{RT\gamma_l}{P_0 v} + \frac{BG_l^0(T)}{T} - B \sum_{K=1}^{N_c} \lambda_K A_K^l = 0, l = N+1, \dots, N+L \quad (13)$$

Из вида (13) очевидно, что, если конденсированная фаза отсутствует т.е.

$$\delta = \frac{G_l^0(T)}{T} - \sum_{K=1}^{N_c} \lambda_K A_K^l > 0, \text{ то всегда может быть найдено } \gamma_l < \frac{P_0 v}{RT} \text{ такое, что выполняется}$$

равенство (13). Причем чем  $\gamma_l$  уменьшается экспоненциально с ростом  $\delta$ . Если  $\delta < 0$ , то разница между химическими потенциалами газовой и жидкой фаз убывает с ростом  $B$ . В [8] предложено считать, что

$$\gamma_l = \exp\left(-\frac{BG_l^0(T)}{T} + B \sum_{K=1}^{N_c} \lambda_K A_K^l\right), l = N+1, \dots, N+L \quad (14)$$

и рекомендовано выбирать  $B \sim 1000$ .

На втором этапе для расчета содержания конденсированной фазы в продуктах сгорания используется точное уравнение (12). При этом найденное на первом этапе решение используется в качестве начального приближения.

## Особенности алгоритма расчета состава продуктов сгорания углеводородных топлив

Для того чтобы естественным путем удовлетворить условию неотрицательности концентраций компонентов фаз, осуществим замену переменных [2, 8]  $\gamma_i = \exp x_i, i=1, \dots, N+L$ .

Выше приведенная система уравнений для расчета термодинамического равновесия является нелинейной. Для поиска ее решения целесообразно использовать метод Ньютона с параметрами релаксации. Суть метода заключается в линеаризации исходной системы уравнений с использованием разложения в ряд Тейлора относительно начального приближения решения  $\bar{x}^0$ :

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = f(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0) + \sum_{i=1}^n (x_i - x_i^0) \frac{\partial}{\partial x_i} f(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0). \quad (15)$$

Как уже отмечалось, нахождение решения системы уравнений (11)-(12) производится с помощью алгоритма, включающего два этапа.

**Первый этап** выполняется для нахождения приближенного решения и определения фазового состава.

1. Вместо удельного объема  $v$  вводится новая переменная  $y = \ln \frac{RT}{P_0 v}$ .
2. Выбирается начальное приближение  $(v_0, T_0, x_i^0)$ , путем решения задачи линейного программирования [19, 20] или способом, рекомендованным в [8, 10].
3. Уравнения (11), (14) линеаризуются в соответствии с (15) и приводятся к виду:

$$x_i = \frac{H_i^0(T_0)}{RT_0^2} (T - T_0) - y - \frac{G_i^0(T_0)}{RT_0} + \frac{1}{R} \sum_{k=1}^{N_i} \lambda_k A_k^i, i=1, \dots, N \quad (16)$$

$$x_l = \frac{BH_l^0(T_0)}{T_0^2}(T - T_0) - \frac{BG_l^0(T)}{T} + B \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^i, i = N+1, \dots, N+L \quad (17)$$

4. Функция  $e^{x_i}$  разлагается в ряд Тейлора в окрестности  $x_i^0$ , с использованием (16),

(17) получаем:

$$e^{x_i} = e^{x_i^0} \left( \frac{H_i^0(T_0)}{RT_0^2}(T - T_0) - y - \frac{G_i^0(T_0)}{RT_0} + \frac{1}{R} \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^i + 1 - x_i^0 \right) \quad (18)$$

$$e^{x_i} = e^{x_i^0} \left( \frac{BH_l^0(T_0)}{T_0^2}(T - T_0) - \frac{BG_l^0(T_0)}{T_0} + B \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^i + 1 - x_i^0 \right) \quad (19)$$

5. Выполняется подстановка выражений (18), (19) в (20). В результате, уравнения (20) образуют замкнутую систему линейных уравнений порядка  $N_e$ . В результате решения которой находятся  $\lambda_j, j=1, 2, \dots, N_e$ .

$$\sum_{i=1}^{N+L} A_K^i e^{x_i} = \gamma_K^0, K = 1, \dots, N_e \quad (20)$$

6. На следующем шаге с использованием (16), (17) рассчитываются  $x_i$ , которые вместе с  $\lambda_j$  используются в качестве начального приближения на следующем шаге итераций после коррекции во избежание возможных выбросов за физически допустимые пределы.

7. Вычисления по пунктам (3)-(6) повторяются до тех пор, пока относительное максимальное отличие величин  $x_i$  между двумя последними шагами итерации не становится меньше допустимой малой величины  $\varepsilon = 10^{-3}$ .

8. Искомое содержание веществ в продуктах сгорания вычисляется из соотношений

$$\gamma_i = \exp x_i, i=1, 2, \dots, N+L.$$



**Второй этап** выполняется для нахождения точного решения. При существовании конденсированных фаз уравнение (7) приобретает следующий вид:

$$\frac{\mu_l}{T} - \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^l = 0 \quad (21)$$

В этом случае, в уточненную систему линейных уравнений вместо (13) (14) входят соответствующие линеаризованные уравнения:

$$-\frac{H_l^0(T_0)}{T_0^2}(T - T_0) + \frac{\mu_l(T_0)}{T_0} - \sum_{K=1}^{N_e} \lambda_K A_K^l = 0 \quad (22)$$

$$e^{x_i} = e^{x_i^0} x_i + (1 - x_i^0) e^{x_i^0} \quad (23)$$

Начальным приближением для второго этапа служит решение, полученное на первом этапе. Итерационный процесс заканчивается при выполнении условия  $\varepsilon < 10^{-6}$ .

Необходимо отметить, что если в качестве известных термодинамических параметров задаются не удельный объем ( $v$ ) и температура ( $T$ ), то систему (18)-(20) необходимо дополнить связями задаваемых параметров с  $v$  и  $T$ . Например, при расчете камеры сгорания считаются известными энтальпия ( $H_K$ ) и давление ( $p_K$ ) продуктов сгорания. В этом случае добавляются линеаризованные калорическое и термическое уравнения состояния.

$$\sum_{i=1}^{N+L} e^{x_i^0} (C_{P_i}(T_0)(T - T_0) + H_i^0(T_0) + H_i^0(T_0)(x_i - x_i^0)) - H_K = 0 \quad (24)$$

$$\sum_{i=1}^N e^{x_i^0} y - e^{-y_0} p_0 y_0 + \sum_{i=1}^N e^{x_i} - p_K e^{-y_0} = 0 \quad (25)$$

Важным этапом при проведении равновесных расчетов является задание термодинамических свойств индивидуальных веществ. В состав продуктов сгорания углеводородного топлива в воздухе может входить около 150 возможных соединений химических элементов  $C, H, O, N, Ar$  [22]. В конденсированной фазе могут находиться сажа  $C(c)$  и перекись водорода  $H_2O_2(c)$ . В работе [22] информация о необходимых термодинамических функциях представлена в универсальном виде. Приводятся коэффициенты полиномов аппроксимирующих табличные данные для приведенного потенциала Гиббса, дифференцируя который могут быть вычислены зависимости от температуры энтальпии, теплоемкости, температурной части выражения для энтропии [22, 5].

При реализации вычислительных алгоритмов необходимо обратить внимание на то, что для сажи  $C(c)$  термодинамические функции (рис. 1)  $H_c^0(T), S_c^0(T), C_{p,c}(T)$  терпят разрыв [22] при температуре фазового перехода  $T_p = 4130 \text{ K}$  (химический потенциал при этом остается непрерывной функцией). Из-за этого во многих случаях при переходе значения температуры через точку  $T=T_p$  происходит нарушение монотонного хода итерационного процесса, что может привести к несходимости алгоритма. Также возможна ситуация, например, при решении задачи расчета равновесного состава с заданным значение энтальпии ( $H_K$ ), когда

$$\sum_{i=1}^N \gamma_{1i} H_i(T_p - \delta) + \gamma_{1c} H_c(T_p - \delta) < H_K < \sum_{i=1}^N \gamma_{2i} H_i(T_p + \delta) + \gamma_{2c} H_c(T_p + \delta). \quad (26)$$

Здесь индексом “1” отмечены равновесные концентрации, найденные при температуре  $T = T_p - \delta$ , индексом “2” – при  $T = T_p + \delta$ . В этом случае решением являются  $T=T_p$  и доля углерода  $0 < \xi < 1$  находящегося в твердом состоянии, такая что:

$$H_K = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i(T_p) + \gamma_c (\xi H_c(T_p - \delta) + (1 - \xi) H_c(T_p + \delta)). \quad (27)$$

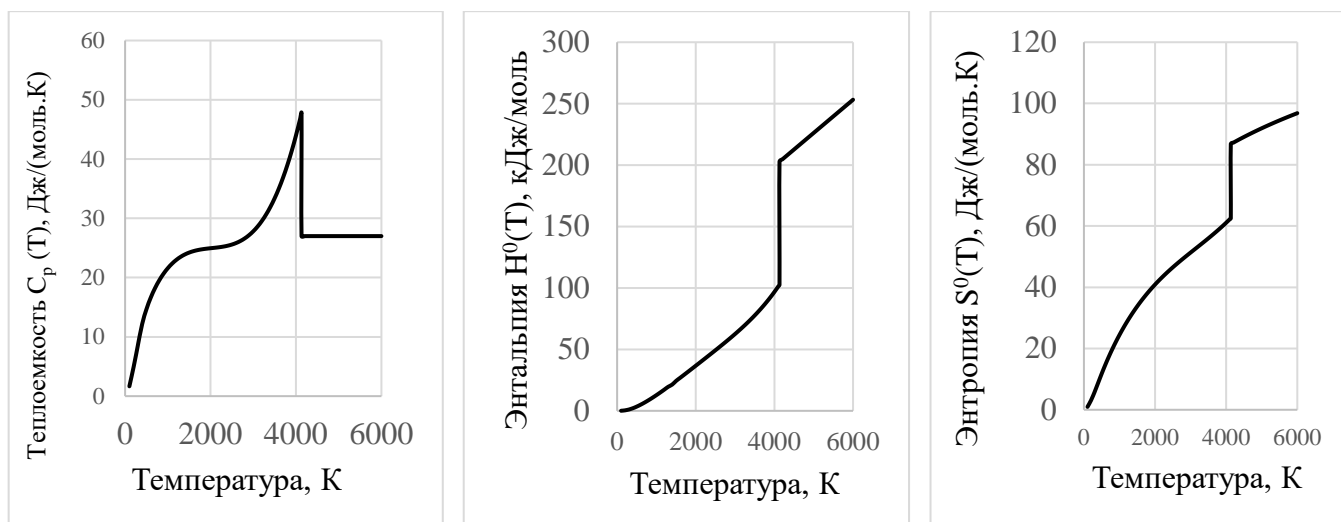


Рис. 1. Зависимость термодинамических параметров  $C(c)$  от температуры

Необходимо отметить, что при использовании метода больших молекул проблема перехода через точку фазового перехода решается введением вместо одного конденсированного углерода двух веществ [11]: “углерод твердый -  $C(m)$ ” со свойствами углерода при  $T < T_p$  и фиксированной теплоемкостью  $C_p = C_{pc}(T_p - \delta) = const$  при  $T > T_p$  и “углерод жидкий -  $C(ж)$ ” со свойствами углерода при  $T > T_p$  и фиксированной теплоемкостью  $C_p = C_{pc}(T_p + \delta) = const$  при  $T < T_p$ . Общий алгоритм расчета в этом случае не меняется.

### Влияние давления сгорания и коэффициента избытка воздуха на состав продуктов сгорания углеводородных топлив

С помощью разработанного алгоритма проведены расчеты параметров продуктов сгорания керосина (брутто-формула  $C_{11}H_{24}$ ; энтальпия – -1947,9 кДж/кг) в воздухе (брутто-формула  $N_{53,91}O_{14,48}Ar_{0,3204}C_{0,0145}$ ; энтальпия – 1,0460 кДж/кг) [7]. Заданными считались энтальпия, давление и элементный состав.

Таблица 1

p (кН)	5000	кр*	500	100	50	25	10	5	2,5
T (К)	1841	1617	1113	848,8	792,6	735,8	658	597	536,1
	1842	1622	1113	850	793	736	657	596	535
C(c) (массовая доля)	0	0	0	0,002	0,01	0,016	0,02	0,03	0,031
	0	0	0	0,003	0,01	0,017	0,02	0,03	0,032
Состав газовой фазы (мольная доля в %)									
H2	8,06	8,57	10,85	11,34	16,09	9,66	7,47	5,28	3,07
	8,052	8,553	10,836	11,28	10,452	9,299	7,06	4,93	2,831
H2O	10,26	9,74	7,44	5,63	6,5	7,62	9,6	11,6	13,73
	10,224	9,724	7,42	5,659	6,431	7,436	9,31	11,1	12,988
N2	62,18	62,18	62,2	63,54	64,69	65,78	67,1	68,1	68,9
	62,263	62,263	62,278	63,275	63,324	63,438	63,7	64	64,137
CO	14,25	13,74	11,41	7,08	4,44	2,36	0,7	0,19	0,04
	14,209	13,709	11,382	6,976	4,285	2,228	0,64	0,17	0
CO2	4,51	5,02	7,34	10,77	11,96	12,74	12,9	12,4	11,69
	4,507	5,007	7,327	10,679	11,652	12,208	12,1	11,5	10,717
CH4	0	0	0,01	0,87	0,93	1,05	1,32	1,57	1,75
	0	0	0	0,812	0,852	0,943	1,17	1,38	1,505

Анализ результатов расчетов и данных справочника [7] подтверждает достоверность разработанного алгоритма. В таб. 1 приведено сравнение параметров потока по сечениям тракта движение, когда сгорает керосин в воздухе при избытке керосина  $\alpha = 0,6$ , давлении в камере сгорания  $p_k = 5 \text{ МПа}$  и продукты сгорания расширяются через сопло Лавая. Математическая модель для расчета процесса расширения в сопле Лавая с использованием метода экстремума термодинамических функций описана в [5,20]. Параметры в выделенных строках табл. 1 получены вышеописанным алгоритмом, в невыделенных – данные из [7]. Различие концентраций веществ в продуктах сгорания, наблюдаемое при закритическом расширении может объясняться наличием в используемой математической модели существенно большего количества химических соединений

чем в [7]. В данных сечениях в состав продуктов сгорания входят еще другие вещества газовой фазы с заметной суммарной массовой (1,5-8%) (рис.4).

Было проведено исследование влияние давления ( $p=1\div 100$  атм.) на состав продуктов сгорания в адиабатическом реакторе при избытке горючего. Из полученных результатов в частности следует, что:

- конденсированная фаза (сажа) входит в состав продуктов сгорания при коэффициенте избытка воздуха  $\alpha < 0.36$ ;

- при  $0.3 < \alpha < 0.36$  концентрация сажи с ростом давления монотонно возрастает (рис. 2), а при  $0.1 < \alpha < 0.25$  монотонно убывает (рис. 3). Это связано с ростом температуры продуктов сгорания с увеличением  $\alpha$  при фиксированном давлении (рис. 5).

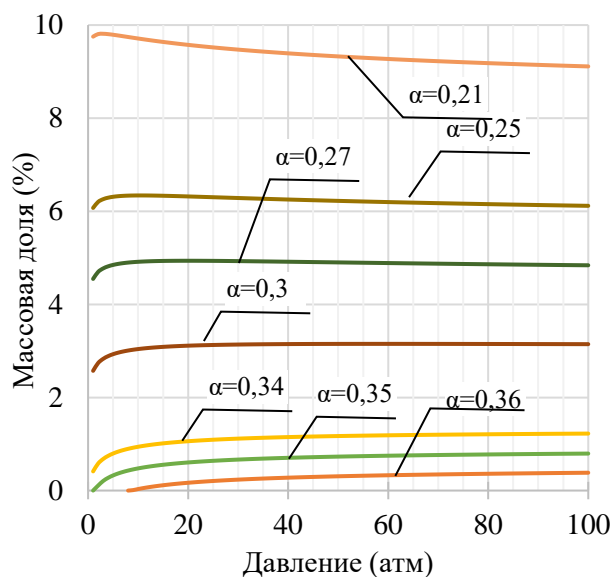


Рис. 2. Содержание сажи в продуктах сгорания при  $\alpha > 0,2$

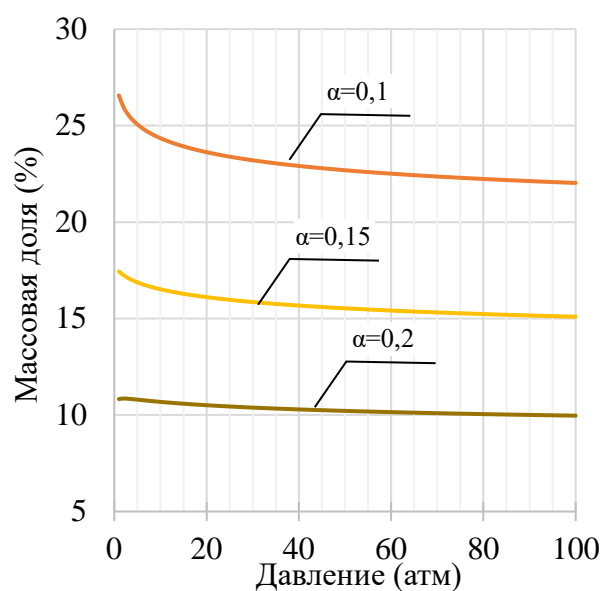


Рис. 3. Содержание сажи в продуктах сгорания при  $\alpha \leq 0,2$

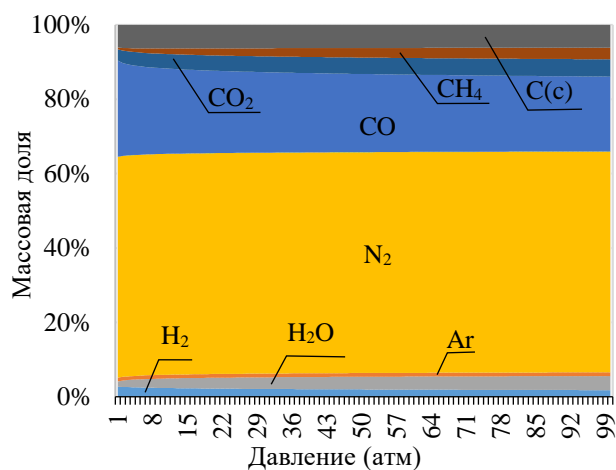


Рис. 4. Зависимость состава продуктов сгорания от давления при  $\alpha=0,25$

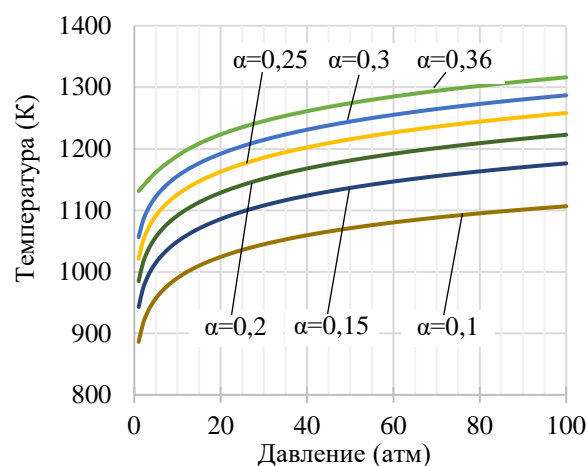


Рис. 5. Изменение температуры сгорания в зависимости от давления

## Выводы

В работе приводится вычислительный алгоритм для расчета равновесного состава продуктов сгорания для случая, когда в них могут содержаться конденсированные компоненты. Показано, что результаты расчета равновесного течения в сопле удовлетворительно совпадают с данными справочника [7]. Проведено исследование влияния давления на количество сажи, образуемое при сгорании углеводородного топлива при избытке горючего в адиабатическом реакторе. Получено, что количество сажи в продуктах сгорания немонотонно зависит от коэффициента избытка окислителя.

*Работа частично выполнена по Государственному заданию  
№FSFF-2020-0013.*

**Библиографический список**

1. Братков А.А., Серегин Е.П., Горенков А.Ф., Чирков А.М., Ильинский А.А., Зрелов В.Н. Химмотология ракетных и реактивных топлив. – М.: Химия, 1987. – 304 с.
2. Алемасов В.Е., Дрегалин А.Ф., Крюков В.Г., Наумов В.И. Математическое моделирование высокотемпературных процессов в энергосиловых установках. - М.: Наука, 1989. - 256 с.
3. Силуянова М.В., Челебян О.Г. Применение альтернативных топлив в авиационных газотурбинных двигателях // Труды МАИ. 2016. № 87. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=69695>
4. Пирумов У.Г., Росляков Г.С. Газовая динамика сопел. – М.: Наука, 1990. - 368 с.
5. Гидаспов В.Ю., Северина Н.С. Некоторые задачи физической газовой динамики. - М.: Изд-во МАИ, 2016. - 195 с.
6. Гиббс Д.В. Термодинамика, статистическая физика. - Москва: Наука, 1982. – 584 с.
7. Алемасов В.Е., Дрегалин А.Ф., Тишин А.П., Худяков В.А. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания / |Под ред. акад. В.П. Глушко. - М.: ВИНТИ, 1971. Т. 3. - 350 с.
8. Ватолин Н.А., Моисеев Г.К., Трусков Б.Г. Термодинамическое моделирование в высокотемпературных неограниченных системах. - М: Metallurgia, 1994. С. 45 – 47.
9. Белов Г.В. Термодинамическое моделирование: методы, алгоритмы, программы. - М.: Научный мир, 2002. С. 64 - 71 с.

10. Трусов Б.Г. Программная система моделирования фазовых и химических равновесий при высоких температурах // Вестник Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. 2012. № 1 (1). С. 21.
11. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование стационарных детонационных волн в смеси частиц алюминия с воздухом // Труды МАИ. 2011. № 49. URL: [http://trudymai.ru/published.php?ID=28605&PAGEN\\_2=3](http://trudymai.ru/published.php?ID=28605&PAGEN_2=3)
12. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование одномерного стационарного равновесного течения в детонационном двигателе // Труды МАИ. 2015. № 83. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=61826>
13. Назырова Р.Р., Пономарев Н.Б. IT-технологии моделирования реальности рабочих тел в процессах жидкостных ракетных двигателей // Инженерный журнал: наука и инновации. 2013. № 4 (16). С. 48.
14. William R.S., Ronald W.M. Chemical Reaction Equilibrium Analysis: Theory and Algorithms, New York, John Wiley & Sons, 1982, 364 p.
15. Крюков В.Г., Абдуллин А.Л., Никандрова М.В., Исхакова Р.Л. Сокращение механизмов реакций при моделировании высокотемпературных течений в соплах // Труды МАИ. 2019. № 105. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=104166>
16. Holub R., Vonka P. The Chemical Equilibria Of Gaseous Systems, Prague, D.Reidel Publishing Company, 1976, 279 p.
17. Meilanov R.P., Magomedov R.A. Thermodynamics in fractional calculus // Journal of Engineering physics and thermophysics, 2014, vol. 87, no. 6, pp. 1521 - 2531. DOI: [10.1007/s10891-014-1158-2](https://doi.org/10.1007/s10891-014-1158-2)



18. Greiner H. Computing complex chemical equilibria by generalized linear programming // Mathematical and Computer Modelling, 1988, vol. 10, no. 7, pp. 529 - 550. DOI: [10.1016/0895-7177\(88\)90082-9](https://doi.org/10.1016/0895-7177(88)90082-9)
19. 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=76946>
20. Назырова Р.Р. Вариационные принципы термодинамики как основа расчета многофазного течения // Математическое моделирование. 2018. Т. 30. № 1. С. 76 – 90.
21. Белов Г.В. Об определении фазового состава сложных термодинамических систем // Журнал физической химии. 2019. Т. 93. № 6. С. 810 - 817.
22. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное издание в 4-х т. - М.: Наука, 1982. Т. 1. Кн. 1. - 495 с.

# Computational algorithm for calculating composition of combustion products of hydrocarbon fuels in the presence of a condensed phase

Duong Minh Duc\*, Gidasov V.Yu.\*\*

*Moscow Aviation Institute (National Research University),  
4, Volokolamskoe shosse, Moscow, A-80, GSP-3, 125993, Russia*

\*e-mail: [dmd.lqd@gmail.com](mailto:dmd.lqd@gmail.com)

\*\*e-mail: [gidasov@mai.ru](mailto:gidasov@mai.ru)

## Abstract

The article describes the computational algorithm that allows computing the equilibrium composition of combustion products of hydrocarbon fuels in the presence of condensed components. The mixture of combustion products was considered as an isolated system of ideal gas without energy interaction and mass exchange with the environment. Numerical methods and computational algorithms, based on the thermodynamic potentials extremum search, are employed for the thermodynamic equilibrium search. The composition of the combustion products of hydrocarbon fuel in the air may include about 150 possible compounds of chemical elements C, H, O, N, Ar, with condensed phases of C(c) and H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>(c) among them. The article presents specifics of the algorithm implementation with regard for thermodynamic functions at the temperature of the phase transition  $T_p$ .

Without this, in many cases, when the temperature value passes through the point  $T = T_p$ , the monotonous iterative process is disrupted, which may lead to the algorithm divergence. The results of numerical simulation of stationary equilibrium flow of combustion products of kerosene with the air in a Laval nozzle are compared with reference

data. The effect of pressure on the composition of combustion products in excess of fuel was studied. Analysis of the computational results and reference data confirms the reliability of the developed algorithm. The impact of pressure ( $p = 1\text{--}100$  atm) on the composition of combustion products in an adiabatic reactor with an excess of fuel was studied. It follows from the obtained results, that the condensed phase ( $p = 1\text{--}100$  atm.) is a part of the combustion products at the air excess coefficient  $\alpha < 0.36$ , the dependence of the soot concentration on the pressure changes qualitatively with the air excess coefficient changing.

**Keywords:** physical gas dynamics, thermodynamic modeling, power plant, hydrocarbon fuel combustion.

### References

1. Bratkov A.A., Seregin E.P., Gorenkov A.F., Chirkov A.M., Il'inskii A.A., Zrelov V.N. *Khimotologiya raketnykh i reaktivnykh topliv* (Chemitology of rocket and jet fuels), Moscow, Khimiya, 1987, 304 p.
2. Alemasov V.E., Dregalin A.F., Kryukov V.G., Naumov V.I. *Matematicheskoe modelirovanie vysokotemperaturnykh protsessov v energosilovykh ustanovkakh* (Mathematical modeling of high-temperature processes in power plants), Moscow, Nauka, 1989, 256 p.
3. Siluyanova M.V., Chelebyan O.G. *Trudy MAI*, 2016, no. 87, available at: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=69695>
4. Pirumov U.G., Roslyakov G.S. *Gazovaya dinamika sopel* (Gas dynamics of nozzles), Moscow, Nauka, 1990, 368 p.

5. Gidaspov V.Yu., Severina N.S. *Nekotorye zadachi fizicheskoi gazovoi dinamiki* (Some problems of physical gas dynamics), Moscow, Izd-vo MAI, 2016, 195 p.
6. Gibbs D.V. *Termodinamika, statisticheskaya fizika* (Some problems of physical gas dynamics), Moscow, Nauka, 1982, 584 p.
7. Alemasov V.E., Dregalin A.F., Tishin A.P., Khudyakov V.A. *Termodinamicheskie i teplofizicheskie svoistva produktov sgoraniya* (Thermodynamic and thermophysical properties of combustion products), Moscow, VINITI, 1971, vol. 3, 350 p.
8. Vatolin N.A., Moiseev G.K., Trusov B.G. *Termodinamicheskoe modelirovaniye v vysokotemperaturnykh neorganicheskikh sistemakh* (Thermodynamic modeling in high-temperature neorganic systems), Moscow, Metallurgiya, 1994, pp. 45 – 47.
9. Belov G.V. *Termodinamicheskoe modelirovaniye: metody, algoritmy, programmy* (Thermodynamic modeling: methods, algorithms, programs), Moscow, Nauchnyi mir, 2002, pp. 64 - 71 p.
10. Trusov B.G. *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta im. N.E. Baumana*, 2012, no. 1 (1), pp. 21.
11. Gidaspov V.Yu. *Trudy MAI*, 2011, no. 49, available at: [http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=28605&PAGEN\\_2=3](http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=28605&PAGEN_2=3)
12. Gidaspov V.Yu. *Trudy MAI*, 2015, no. 83, available at: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=61826>
13. Nazyrova R.R., Ponomarev N.B. *Inzhenernyi zhurnal: nauka i innovatsii*, 2013, no. 4, (16), pp. 48.
14. William R.S., Ronald W.M. *Chemical Reaction Equilibrium Analysis: Theory and Algorithms*, New York, John Wiley & Sons, 1982, 364 p.

15. Kryukov V.G., Abdullin A.L., Nikandrova M.V., Iskhakova R.L. *Trudy MAI*, 2019, no. 105, available at: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=104166>
16. Holub R., Vonka P. *The Chemical Equilibria Of Gaseous Systems*, Prague, D.Reidel Publishing Company, 1976, 279 p.
17. Meilanov R.P., Magomedov R.A. Thermodynamics in fractional calculus, *Journal of Engineering physics and thermophysics*, 2014, vol. 87, no. 6, pp. 1521 - 2531. DOI: [10.1007/s10891-014-1158-2](https://doi.org/10.1007/s10891-014-1158-2)
18. Greiner H. Computing complex chemical equilibria by generalized linear programming *Mathematical and Computer Modelling*, 1988, vol. 10, no. 7, pp. 529 - 550. DOI: [10.1016/0895-7177\(88\)90082-9](https://doi.org/10.1016/0895-7177(88)90082-9)
19. Nazyrova R.R. *Trudy MAI*, 2017, no. 92, available at: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=76946>
20. Nazyrova R.R. *Matematicheskoe modelirovanie*, 2018, vol. 30, no. 1, pp. 76 - 90.
21. Belov G.V. *Zhurnal fizicheskoi khimii*, 2019, vol. 93, no. 6, pp. 810 - 817.
22. Gurvich L.V., Veits I.V., Medvedev V.A. et al. *Termodinamicheskie svoistva individual'nykh veshchestv* (Thermodynamic properties of individual substances), Moscow, Nauka, 1982, vol. 1, book 1, 495 p.