

УДК 662.612:32

# ПРИМЕНЕНИЕ ДЕТАЛЬНЫХ И ПРИВЕДЕННЫХ КИНЕТИЧЕСКИХ СХЕМ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ДЕТОНАЦИИ ВОДОРОДОВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ С РАЗБАВИТЕЛЕМ

И. А. Бедарев<sup>1,2</sup>, К. В. Рылова<sup>1,3</sup>, А. В. Фёдоров<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, 630090 Новосибирск, bedarev@itam.nsc.ru, rhbcnbyf.ru@mail.ru, fedorov@itam.nsc.ru

<sup>2</sup>Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, 630008 Новосибирск

<sup>3</sup>Новосибирский государственный технический университет, 630073 Новосибирск

Обоснована возможность использования некоторых кинетических моделей для описания детонации газовой водородовоздушной смеси. Численно реализована иерархия математических моделей от простейшей модели горения в статических условиях до модели нестационарной неравновесной газовой динамики. Проведена верификация по экспериментальным данным по времени задержки воспламенения в зависимости от температуры и по скорости детонационной волны в зависимости от разбавления смеси аргоном или азотом. На основе детальных и приведенных кинетических механизмов неравновесных химических превращений в рамках прикладного пакета ANSYS Fluent создана математическая технология для описания распространения ячеистой детонации в каналах технических устройств. Показано, что при ширине канала 30 мм в смеси, разбавленной на 92 % аргоном, размер ячейки соответствует экспериментальным данным.

Ключевые слова: подавление детонации, математическое моделирование, смесь реагирующих газов и инертных частиц.

DOI 10.15372/FGV20150503

## ВВЕДЕНИЕ

Физико-математическое моделирование поведения горючих газовых смесей под ударно-волновой нагрузкой является важной проблемой как в теоретическом, так и в практическом аспекте. Использование детонации в новых поколениях двигателей, а также проблема обеспечения взрыво- и пожаробезопасности позволяют рассматривать процессы горения и детонации газовых смесей как актуальную задачу механики неравновесных сред. Важна роль водорода и в качестве горючего. В настоящее время он считается одним из важнейших сырьевых ресурсов будущего. Все это требует более точного представления о характеристиках его взрыва. Для этого необходимо знать механизмы воспламенения, горения и детонации водорода, так же как и способы управления этими процессами.

---

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 12-08-00311-а, 12-07-00571-а) и Министерства образования и науки РФ (проект № 211, задание № 2014/140).

© Бедарев И. А., Рылова К. В., Фёдоров А. В., 2015.

Важную роль при этом играет адекватность моделей воспламенения и горения водорода, в частности, соответствие результатов расчета по определенным кинетическим схемам и данным экспериментов по времени задержки воспламенения и скорости детонационной волны в зависимости от начальных параметров. Это позволит, например, с большим доверием относиться к данным по моделированию подавления детонации инертными частицами [1].

В настоящей работе представлено обоснование использования некоторых кинетических моделей для описания процессов воспламенения и горения газовой водородовоздушной смеси. Вопрос о выборе кинетического механизма горения водорода очень важен при моделировании течения, в котором сгорает водородное топливо. Так, широкое применение получили двухстадийные модели химического превращения, в которых при помощи уравнения аррениусовского типа предварительно моделируется этап индукции, а после него — тепловыделение [2–4]. Однако использование таких моделей не всегда возможно. Это связано с трудностями достоверного определения эмпириче-

ских констант в широком диапазоне определяющих параметров и невозможностью использовать двухэтапный подход для некоторых критических режимов детонации.

Следующим шагом в описании неравновесных химических реакций окисления водорода являются детальные кинетические схемы. Подобные модели достоверно объясняют динамику превращений по мере развития реакции и верно воспроизводят процесс как на стадии воспламенения, так и на стадии горения. Судить об адекватности моделирования на стадии воспламенения можно по таким параметрам, как пределы воспламенения и время его задержки (период индукции). Для детальных кинетических схем в литературе можно найти информацию о том, как следует подбирать кинетические константы — на основе теоретического анализа или же по экспериментальным данным. Некоторые константы скоростей прямых и обратных реакций собраны в работах [5, 6], где с определенной полнотой описаны механизмы горения водорода в воздухе. При выборе конкретной кинетической схемы необходимо сравнивать значения констант скорости с экспериментальными данными по нескольким параметрам.

Исследование кинетических механизмов, собранных в [5, 6], продолжалось и далее. Так, в [7] нами проведен сравнительный анализ трех моделей химической кинетики воспламенения и горения водорода в кислороде и трех газодинамических моделей течения реагирующей смеси за фронтом инициирующей ударной волны. Численный анализ рассчитанных кинетических схем горения водорода показал, что схема [8] из 38 реакций с участием 8 компонентов наилучшим образом описывает эти (привлекаемые нами) экспериментальные данные. В настоящей работе дан анализ моделей химической кинетики горения водорода в воздухе [8, 9] и проведено их сравнение с экспериментальными данными по времени задержки воспламенения [10–18] и скорости детонации [19–21]. Расчеты воспламенения и горения водорода за ударной волной в смеси  $\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{Ar}$ , содержащей 1 ÷ 10 %  $\text{H}_2 + \text{O}_2$ , выполнены при температуре  $900 < T < 2700$  К и давлении  $1 < p < 5$  атм. Для смеси  $\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{N}_2$ , содержащей 1 ÷ 44.38 %  $\text{H}_2 + \text{O}_2$ , они выполнены при  $800 < T < 1500$  К и  $0.27 < p < 4$  атм.

Кроме того, для упрощения отладки методики двух- и трехмерных расчетов с горением и

детонацией в пакете ANSYS Fluent разработана и по экспериментальным данным верифицирована приведенная одностадийная модель воспламенения и горения водорода в воздухе.

## ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим ударную трубу, заполненную смесью водорода, кислорода и аргона или азота. По смеси распространяется ударная волна (УВ). При некоторых числах Маха УВ параметры смеси могут превысить критическое значение и произойдет ее воспламенение и горение.

Построим иерархию математических моделей в рамках подхода нестационарной неравновесной газовой динамики с относительно полной кинетикой и с простой модельной кинетикой химических превращений в смеси в статических условиях.

В одномерной постановке в случае использования детальной кинетики динамика смеси описывается уравнениями неравновесной газовой динамики:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho E + p)u]}{\partial x} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $E = e + u^2/2$  — полная энергия,  $\rho$ ,  $u$ ,  $p$ ,  $e$  — плотность, скорость, давление и внутренняя энергия смеси соответственно. Внутренняя энергия реакционноспособной смеси определяется по соотношению

$$e = c_v T + \sum_{i=1}^N \xi_i h_{0i} - c_p T_{00}, \quad (2)$$

где  $c_p$ ,  $c_v$  — удельная теплоемкость смеси при постоянном давлении и постоянном объеме,  $c_v = \sum_{i=1}^N c_{vi} \xi_i$ ,  $\xi_i$  — относительная массовая концентрация  $i$ -го компонента,  $h_{0i}$  — энтальпия образования  $i$ -го компонента,  $N$  — количество компонентов смеси,  $T_{00} = 298.15$  К. Система (1) должна быть дополнена уравнением состояния

$$p = \rho T R \sum_{i=1}^N \frac{\xi_i}{\mu_i} \quad (3)$$

и кинетическими уравнениями химических превращений (приведенными ниже). Здесь  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $\mu_i$  — молекулярная масса  $i$ -го компонента.

Для описания химических превращений будем использовать детальные кинетические механизмы [8, 9]. Кинетическая схема [8] включает в себя 38 прямых и обратных реакций и 9 химических компонентов:  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{HO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$  и  $\text{Ar}/\text{N}_2$ . В [8] приведены константы скоростей прямых и обратных реакций.

Кинетический механизм [9] является максимально полным механизмом окисления водорода в воздухе и содержит 308 прямых и обратных реакций с участием 26 химических компонентов. В настоящей работе количество реакций и химических компонентов было редуцировано: не учитывались реакции с  $\text{O}_3$  и  $\text{NH}_x\text{O}_y$ , так как концентрации этих компонентов не превышают  $10^{-8}$  и в рассматриваемых нами проблемах не оказывают заметного влияния на воспламенение и горение смеси. В связи с этим в кинетической схеме учитывалось 88 прямых и обратных реакций при горении в воздухе и 44 прямые и обратные реакции при горении в кислороде. Рассматривалось 13 химических компонентов:  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{N}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{HO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{N}_2\text{O}$ ,  $\text{N}_2/\text{Ar}$ . Константы скоростей прямых и обратных реакций также представлены в [9]. Реакции, которые входят в кинетический механизм [8], присутствуют в схеме [9] и различаются лишь константами скорости.

В общем виде стехиометрическое уравнение реакции имеет вид

$$\sum_{i=1}^N \nu_{ir} A_i = \sum_{i=1}^N \nu'_{ir} A'_i.$$

Здесь  $A_i$  — химический символ исходного реагирующего вещества,  $\nu_i$  — стехиометрический коэффициент, штрихом отмечены параметры продуктов реакции, индексом  $r$  обозначен номер реакции. Если химический компонент  $A_i$  не является исходным продуктом (продуктом реакции), соответствующий стехиометрический коэффициент равен нулю.

Молярно-объемная скорость образования  $i$ -го компонента в  $r$ -й реакции выражается формулой

$$R_{ir} = (\nu'_{ir} - \nu_{ir}) \left[ k_{fr} \prod_{i=1}^N W_i^{\nu_{ir}} - k_{br} \prod_{i=1}^N W_i^{\nu'_{ir}} \right],$$

здесь  $W_i = \rho_i/\mu_i$  — молярно-объемная концентрация, моль/м<sup>3</sup>;  $k_{fr}$ ,  $k_{br}$  — скорости прямой и обратной реакций;  $\rho_i = \xi_i \rho$  — парциальная плотность компонента  $i$ ;  $\rho = \sum_{i=1}^N \rho_i$  — плот-

ность смеси. Тогда уравнения химической кинетики для молярно-объемных концентраций будут иметь вид

$$\frac{dW_i}{dt} = \sum_{r=1}^l R_{ir},$$

где  $l$  — число реакций.

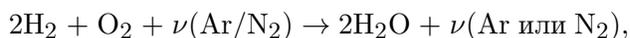
В итоге изменение относительной массовой концентрации  $i$ -го компонента находится с помощью уравнений химической кинетики

$$\frac{d\xi_i}{dt} = \frac{1}{\rho} \mu_i \sum_{r=1}^l \rho^{m_r} (\nu'_{ir} - \nu_{ir}) \times \left[ k_{fr} \prod_{\beta=1}^N \left( \frac{\xi_\beta}{\mu_\beta} \right)^{\nu_{\beta r}} - k_{br} \prod_{\beta=1}^N \left( \frac{\xi_\beta}{\mu_\beta} \right)^{\nu'_{\beta r}} \right]. \quad (4)$$

Здесь  $m_r$  — порядок  $r$ -й реакции,  $i = 1, \dots, N$ .

Тем самым задача определения параметров смеси в ударной трубе сведена к решению некоторой начально-краевой задачи для системы уравнений в частных производных (1), уравнения состояния (3) и уравнений (4). Будем называть данную математическую модель нестационарной.

При использовании приведенной одностадийной модели уравнения химической кинетики (3) упрощаются. Горение стехиометрической смеси водорода и кислорода с аргоном будем описывать одной интегральной необратимой брутто-реакцией



в которой стехиометрический коэффициент  $\nu$  зависит от степени разбавления смеси аргоном или азотом. Тогда уравнения химической кинетики (4) сводятся к следующему:

$$\frac{d\xi_i}{dt} = \chi_i, \quad i = 1, 2, 3,$$

где  $\chi_i = -\nu_i \mu_i \chi$ ,

$$\chi = \rho^2 k_f \frac{\xi_1^m \xi_2^n}{\mu_1 \mu_2}$$

— скорость химической реакции,

$$k_f = k T^w \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

— коэффициент скорости химической реакции; индексы:  $i = 1$  — водород,  $i = 2$  — кислород,  $i = 3$  — вода;  $R = 8.314$  Дж/(К · моль). Константами, которые нужно определить в этой модели, являются:  $k$  — предэкспоненциальный множитель,  $E$  — энергия активации,  $m$ ,  $n$ ,  $w$  — показатели степени,  $Q$  — теплота химической реакции. Естественно, что эти величины должны иметь правдоподобные, физически обоснованные значения.

Если процесс горения смеси в ударной трубе считать стационарным и перейти к автономной переменной, связанной с координатой фронта УВ,  $\zeta = x - Dt$ , где  $D$  — скорость УВ, то задача о бегущей волне воспламенения/горения сведется к решению обыкновенного дифференциального уравнения для скорости:

$$\begin{aligned} \frac{du}{d\zeta} = & \\ = \frac{1}{u^2 - c_f^2} \left\{ \frac{R}{c_v \mu_{см}} \sum_{i=1}^N \frac{d\xi_i}{dt} (c_{vi}T + h_{0i} - c_{pi}T_{00}) - \right. & \\ \left. - RT \sum_{i=1}^N \frac{1}{\mu_i} \frac{d\xi_i}{dt} \right\}. & \quad (5) \end{aligned}$$

Здесь  $\mu_{см}$  и  $c_f$  — молекулярная масса и замороженная скорость звука смеси. При этом значения газодинамических параметров в зоне химической релаксации находятся из законов сохранения массы, импульса и энергии как функции скорости смеси. Дополнив уравнение (5) уравнениями химической кинетики (4) с учетом соотношения  $\frac{d}{dt} = (u - D) \frac{d}{d\zeta}$ , получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений, для которой ставится задача Коши с начальными условиями для массовых концентраций

$$\xi_i|_{\zeta=0} = \xi_{i0} \quad (6)$$

и начальным условием для скорости

$$u|_{\zeta=0} = u_f,$$

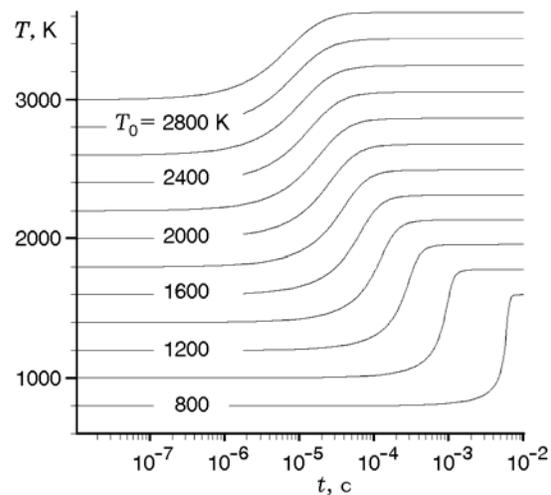


Рис. 1. Поведение температуры смеси во времени при различных начальных ее значениях

где  $u_f$  — скорость за фронтом замороженной УВ. Назовем эту модель стационарной.

Так же можно построить и модель воспламенения в статических условиях (т. е. скорость смеси везде равна нулю). Такие условия соответствуют воспламенению газа за отраженной УВ. В этом случае уравнения сохранения упрощаются:

$$\frac{d\rho}{dt} = 0, \quad \frac{de}{dt} = 0.$$

Тогда для температуры смеси можно получить следующее уравнение:

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{1}{c_v} \sum (c_{vi}T + h_{0i} - c_{pi}T_{00}) \frac{d\xi_i}{dt}. \quad (7)$$

В правой его части присутствует тепловыделение за счет химической реакции и изменения теплоемкости смеси.

Решение задачи Коши для уравнения (7) с использованием приведенной кинетики, соответствующее физико-химическому процессу воспламенения смеси, представлено на рис. 1. Показано поведение температуры смеси во времени при ее различных начальных значениях. Из рисунка видно, что даже такая упрощенная модель (статическая) позволяет адекватно воспроизвести период задержки воспламенения смеси (см. протяженное плато на зависимости перед резким возрастанием температуры, которое соответствует периоду индукции).

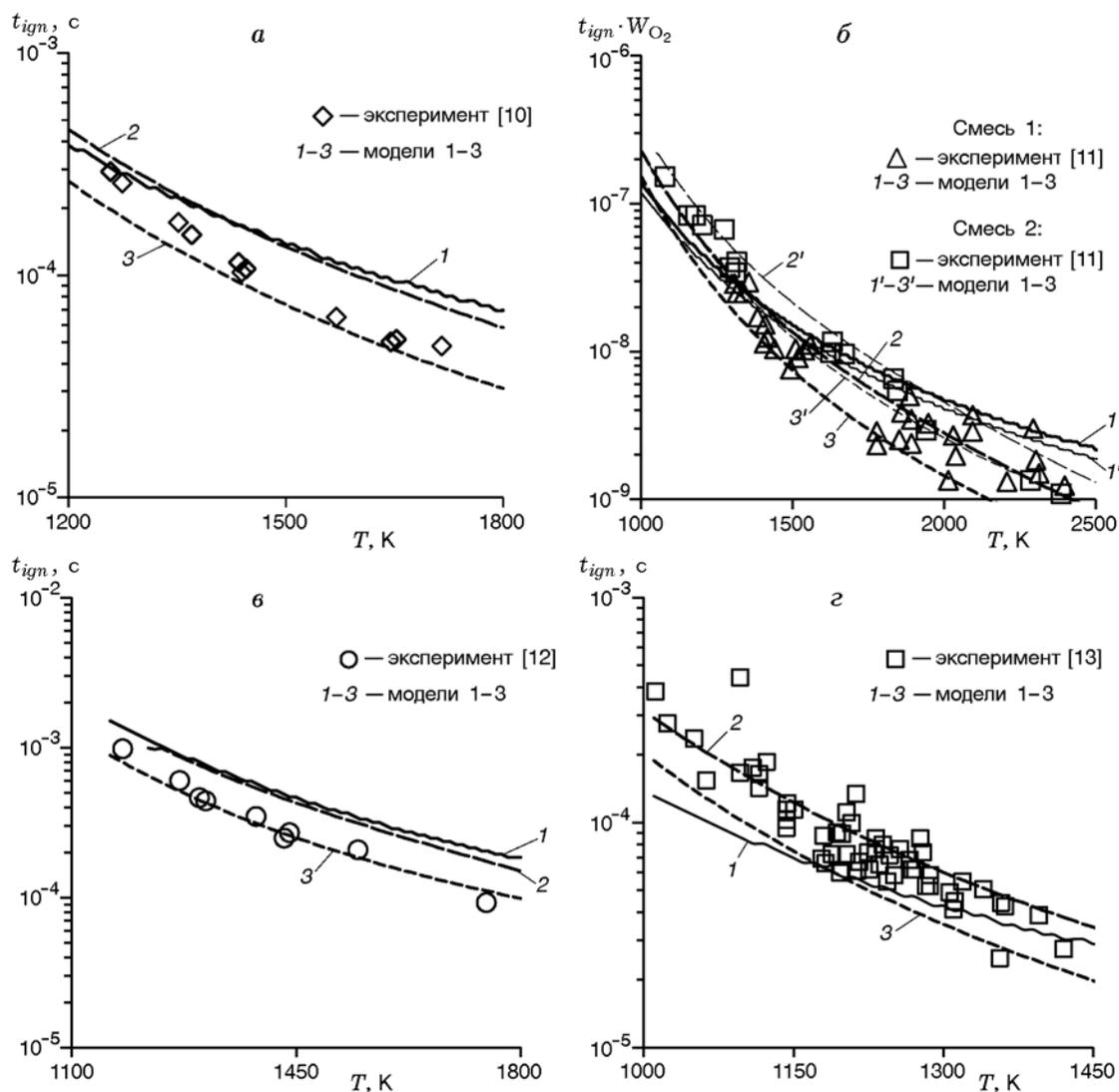


Рис. 2. Верификация кинетических схем 1–3 по экспериментальным данным [10–13] для водородокислородной смеси, разбавленной аргоном

### ВЕРИФИКАЦИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ СХЕМ ПО ВРЕМЕНИ ЗАДЕРЖКИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ

Общая верификация кинетических схем для приведенной одностадийной кинетики и кинетических схем [8, 9] проводилась по времени задержки воспламенения для смеси кислорода в водороде при добавлении в него аргона либо азота на основе статической модели (7). Для удобного представления на графиках обозначим приведенную одностадийную кинетику как модель 1, детальную кинетику из работы [8] — как модель 2, а из работы [9] — как модель 3.

### Смесь водород — кислород — аргон

На рис. 2 приведены данные верификации кинетических схем 1–3 с помощью экспериментальных данных [10–13] по зависимости времени задержки воспламенения смеси, разбавленной аргоном, от температуры. В работе [7] нами было показано, что важным моментом является выбор критерия, по которому определяется момент воспламенения. Критерием воспламенения в экспериментах могут выступать моменты реализации максимума концентрации радикала  $\text{OH}$ , максимума скорости изменения концентрации этого радикала и другие показатели. В расчетах по детальным схемам в ка-

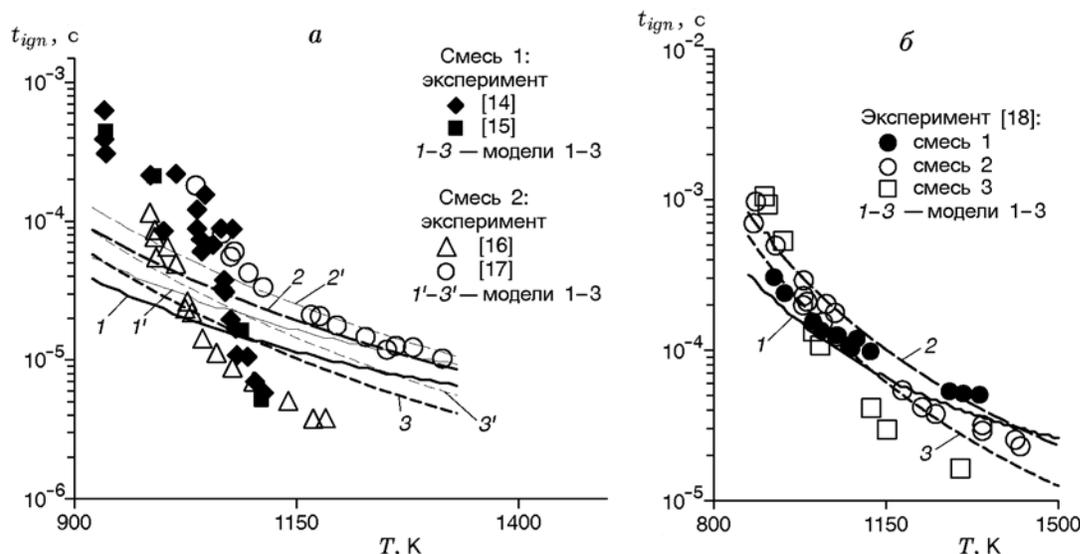


Рис. 3. Верификация кинетических схем 1–3 по экспериментальным данным [14–18] для водород-кислородной смеси, разбавленной азотом

честве критерия воспламенения нами использован критерий, соответствующий экспериментам, а в расчетах по приведенной кинетике избран момент достижения максимума скорости роста температуры.

В эксперименте [10], данные которого приведены на рис. 2,а, смесь содержала 1 %  $H_2$ , 1 %  $O_2$  и 98 %  $Ar$  при начальном давлении  $p_1 = 1.6$  атм. Видно, что результаты, полученные по модели 3, проходят по нижней границе экспериментальных данных, а полученные по моделям 1 и 2 — по верхней границе.

На рис. 2,б представлена зависимость времени задержки воспламенения от температуры для смесей с концентрацией аргона 96 % (смесь 1) и 94 % (смесь 2) при заданном давлении  $p_1 = 1$  атм. Видно, что расчеты по всем моделям лежат внутри разброса экспериментальных данных [11]. При этом модель 1 дает верхнюю границу экспериментальных данных, а модель 3 — нижнюю.

На рис. 2,в представлены данные экспериментов [12] со смесью 1.03 %  $H_2$ , 0.5 %  $O_2$  и 98.47 %  $Ar$  при  $p_1 = 1$  атм. Результаты расчета по модели 3 проходят по экспериментальным данным, а полученные по двум другим моделям лежат чуть выше.

Сравнение расчетов по моделям 1–3 с экспериментами [13] со смесью 6.67 %  $H_2$ , 3.33 %  $O_2$  и 90 %  $Ar$  при  $p_1 = 1.9$  атм пока-

зало хорошее согласие результатов.

### Смесь водород — кислород — азот

Верификацию кинетических схем 1–3 по экспериментальной зависимости времени задержки воспламенения смеси, разбавленной азотом, от температуры иллюстрирует рис. 3. В экспериментах [14, 15] смесь состояла из 15 %  $H_2$ , 17.85 %  $O_2$  и 67.15 %  $N_2$  при  $p_1 = 3$  атм (смесь 1), в экспериментах [16, 17] — из 29.59 %  $H_2$ , 14.79 %  $O_2$  и 55.62 %  $N_2$  при  $p_1 = 2$  атм (смесь 2). Из рис. 3,а видно, что расчеты по моделям 1–3 укладываются в разброс экспериментальных точек [14–17] при  $T > 1000$  К и имеют заниженное время задержки воспламенения в низкотемпературной области.

Сравнение эксперимента [18] с расчетами по используемым кинетическим моделям представлено на рис. 3,б. В экспериментах использовалась смесь 29.59 %  $H_2$ , 14.79 %  $O_2$  и 55.62 %  $N_2$  при  $p_1 = 0.27$  (смесь 1), 0.5 (смесь 2) и 1 атм (смесь 3). В расчете рассмотрена смесь при  $p_1 = 0.5$  атм. Полученная зависимость хорошо согласуется с экспериментальной.

В целом можно сделать вывод, что кинетические схемы хорошо работают в диапазоне температуры  $1100 \div 2700$  К и хуже в низкотемпературной области  $900 \div 1100$  К.

Таблица 1

Скорость детонационной волны в зависимости от концентрации аргона в смеси  $(100 - x)(2\text{H}_2 + \text{O}_2) + x\text{Ar}$ ,  $p_1 = 0.2$  атм

Смесь	Эксперимент [19]	Модель 1		Модель 2		Модель 3	
	$D_{СД}$ , м/с	$D_{СД}$ , м/с	$M_{СД}$	$D_{СД}$ , м/с	$M_{СД}$	$D_{СД}$ , м/с	$M_{СД}$
$2\text{H}_2 + \text{O}_2$	2750.0	2895.3	5.4	2739.55	5.05	2631	4.85
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 30\% \text{Ar}$	—	2368.2	5.2	2116.15	5	2001.87	4.73
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 50\% \text{Ar}$	—	1926.4	5.145	1834.95	4.83	1758.97	4.63
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 77.5\% \text{Ar}$	1557.0	1460.7	4.3	1551.36	4.55	1520.67	4.46
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 80\% \text{Ar}$	1518.0	1374.8	4.08	1521.93	4.5	1491.5	4.41
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 85\% \text{Ar}$	1415.0	1249.3	3.76	1431.99	4.3	1415.34	4.25
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 87\% \text{Ar}$	1357.0	1162.6	3.52	1357.32	4.1	1373.87	4.15
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 88\% \text{Ar}$	1319.0	1110.6	3.37	1303.88	3.95	1333.89	4.05
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 89\% \text{Ar}$	1279.0	1082.6	3.295	1267.23	3.85	1239.56	3.93
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 90\% \text{Ar}$	1235.0	1065.5	3.25	1240.67	3.78	1247.26	3.8

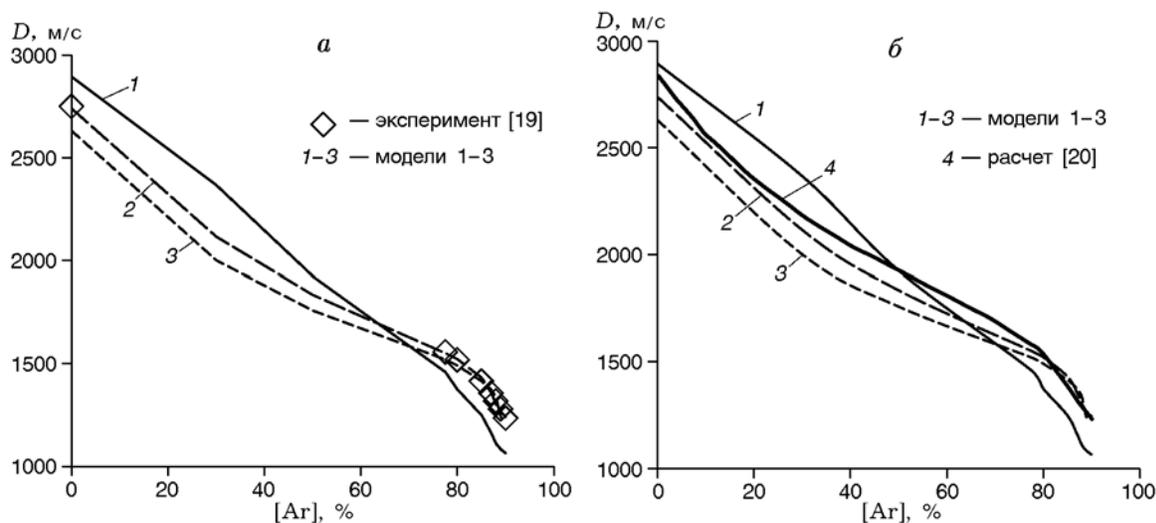


Рис. 4. Зависимость скорости детонационной волны от разбавления смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  аргоном

## ВЕРИФИКАЦИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ СХЕМ ПО СКОРОСТИ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ

### Смесь, разбавленная аргоном

Проведено сопоставление расчетных данных с использованием трех кинетических схем с экспериментами [19] по скорости детонационной волны в зависимости от разбавления смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  аргоном. Расчеты выполнены по стационарной модели (4)–(6). В табл. 1 сведены расчетные и экспериментальные значения скорости детонационной волны.

Построенная по данным табл. 1 зависимость скорости детонационной волны от разбавления смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  аргоном при  $p_1 = 0.2$  атм дана на рис. 4,а. Из табл. 1 и рис. 4,а видно, что расчеты скорости по моделям с детальной кинетикой лучше соответствуют экспериментальным данным, однако и приведенная кинетика дает расхождение не более 10 %.

Представленные на рис. 4,б данные наших расчетов по моделям 1–3 для смеси  $(100 - x)(2\text{H}_2 + \text{O}_2) + x\text{Ar}$ , концентрация аргона в которой изменялась в диапазоне  $0 < x < 90\%$ ,

Таблица 2

Скорость детонационной волны в зависимости от концентрации азота в смеси  $(100 - x)(2\text{H}_2 + \text{O}_2) + x\text{N}_2$ ,  $p_1 = 1$  атм

Смесь	Эксперимент [21]	Модель 1		Модель 2		Модель 3	
	$D_{СД}$ , м/с	$D_{СД}$ , м/с	$M_{СД}$	$D_{СД}$ , м/с	$M_{СД}$	$D_{СД}$ , м/с	$M_{СД}$
$2\text{H}_2 + \text{O}_2$	2750.0	2981	5.56	2739.55	5.05	2712.43	5
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{N}_2$	2407	2453	5.3	2340.18	5	2326.14	4.97
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 2\text{N}_2$	—	2197	5.1	2155.68	4.95	2120.84	4.87
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 3\text{N}_2$	2055	1982	4.8	2043.85	4.9	2006.31	4.81
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 3.81\text{N}_2$	—	1875	4.65	1987.08	4.88	1938.21	4.76
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 5\text{N}_2$	1822	1730	4.4	1917.52	4.83	1865.91	4.7

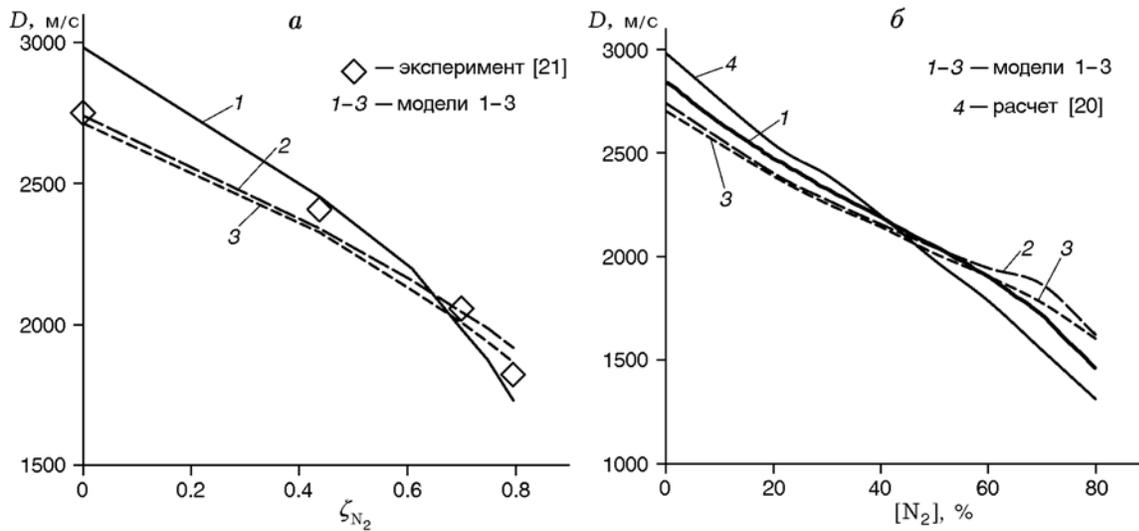


Рис. 5. Зависимость скорости детонационной волны от разбавления в смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$  азотом

при  $p_1 = 1$  атм также хорошо согласуются с результатами расчета [20].

#### Смесь, разбавленная азотом

Данные расчета скорости детонации смеси  $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ , разбавленной азотом, при  $p_1 = 1$  атм приведены в табл. 2 в сопоставлении с экспериментами [21]. Построенная по этим данным зависимость скорости детонационной волны от концентрации азота в смеси представлена на рис. 5,а. Видно, что модели с детальной кинетикой удовлетворительно соответствуют эксперименту.

Зависимости скорости детонационной волны от содержания азота, полученные по моделям 1–3, также хорошо согласуются с расчетом [20] (рис. 5,б). Здесь рассматривалась смесь

$(100 - x)(2\text{H}_2 + \text{O}_2) + x\text{N}_2$ , концентрация азота в которой изменялась в диапазоне  $0 < x < 80$  % при  $p_1 = 1$  атм.

Таким образом, выбранные модели позволяют удовлетворительно описывать время задержки воспламенения и такой интегральный параметр, как скорость детонационной волны в смесях водород — кислород — аргон, водород — воздух.

#### НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ОДНОМЕРНОЙ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ

Следующий шаг проверки адекватности выбранных кинетических схем заключался в использовании данной модели неравновесной газовой динамики для описания продольной неустойчивости. В [22–24] описана продольная

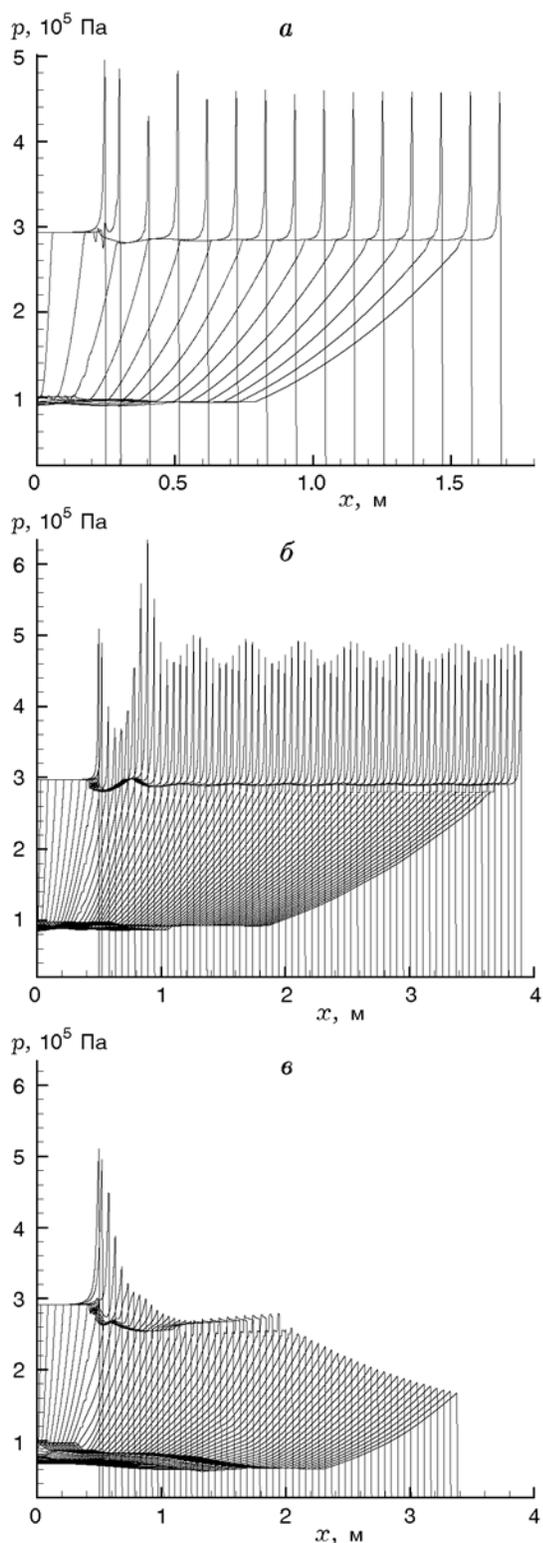


Рис. 6. Стационарный, пульсирующий и затухающий режимы распространения детонационной волны

неустойчивость детонационной волны, возникающая в детонационных процессах при исследовании в рамках модели одномерной нестационарной неравновесной газовой динамики с учетом модельных одно- и двухстадийных кинетических законов окисления реагирующего компонента. Данный тип неустойчивости часто интерпретируется как проявление ячеистой структуры детонации в одномерном нестационарном подходе. Он возникает при некоторых условиях на значения энергии активации и теплоподвода при решении задачи об ослаблении пересжатой детонационной волны волной разрежения. Оказалось, что возможен выход как на режим Чепмена — Жуге, так и на колебательный аттрактор. Эта задача является дополнительной тестовой задачей для применяемой нами приведенной кинетики.

В начальный момент времени данные Коши задавались как пересжатая детонационная волна. Далее решение проводилось на основе одномерных нестационарных уравнений Эйлера, дополненных уравнениями неравновесной кинетики химических превращений. Для численной реализации системы одномерных нестационарных уравнений неравновесной газовой динамики для аппроксимации по времени применялся конечно-разностный метод типа универсального алгоритма. Для пространственной аппроксимации использована TVD-схема третьего порядка точности с расщеплением вектора потоков по Ван Лиру и адаптацией сетки в зависимости от градиента плотности. Детали алгоритма, а также данные тестирования используемого численного метода изложены в [25].

В зависимости от энергии активации, теплоты химической реакции и степени пересжатия были промоделированы ситуации, когда детонационная волна распространяется в стационарном (рис. 6,*a*), пульсирующем (рис. 6,*б*) и затухающем (рис. 6,*в*) режимах.

Таким образом, в соответствии с линейной теорией и численными расчетами, выполненными по другим методам [22–24], показано, что на основе разработанной приведенной кинетики при изменении энергии активации реализуются различные режимы выхода на аттракторы решения детонационной задачи.

## РАСЧЕТЫ ДВУМЕРНЫХ ДЕТОНАЦИОННЫХ ТЕЧЕНИЙ

Одним из важнейших свойств детонационной волны является ее поперечная неоднородность, в результате которой образуются структуры, называемые детонационными ячейками. Численное моделирование ячеистой структуры волны газовой детонации проводилось во многих работах. В частности, в [26] такие расчеты выполнены для описания детонации в смеси водород — кислород — аргон при низком давлении, при этом использовались детальные кинетические схемы. В работе [27] рассчитана ячеистая структура детонации в водородокислородной смеси с добавками аргона, при этом химическая кинетика описывалась по приведенной модели химических превращений [3, 4].

Следующий шаг тестирования моделей химической кинетики заключался в проверке возможности реализовать на их основе ячеистую детонацию. Для этой цели разработана математическая технология расчетов двумерных детонационных течений в пакете ANSYS Fluent. В качестве математической модели вновь использованы уравнения Эйлера для описания неравновесных невязких течений в двумерном нестационарном течении. Кратко остановимся на методе расчета. Для аппроксимации по времени использовались как явная схема 4-го порядка типа Рунге — Кутты, так и неявная схема 2-го порядка. Оказалось, что для расчета невязких течений предпочтительнее явная схема. Расчеты показали, что неявная схема обладает существенно большей численной диссипацией, чем явный метод 4-го порядка, что приводит к сильному «размазыванию» ударно-волновых фронтов. Однако в силу ограничений по условиям устойчивости использование явной схемы для задач с учетом вязкости затруднительно из-за значительного возрастания времени расчета. Вязкая постановка в этом случае потребует слишком малого шага по времени с точки зрения реализуемости расчета на компьютере. Для аппроксимации по пространству задействован метод расщепления вектора потоков AUSM с противопотоковой схемой 2-го порядка.

Был проведен расчет двумерной детонационной ячейки для канала шириной 30 мм в смеси водорода и кислорода, разбавленной на 92 % (по массе) аргоном. На рис. 7 представлен фрагмент расчетной сетки, которая динамически адаптировалась по градиенту плот-

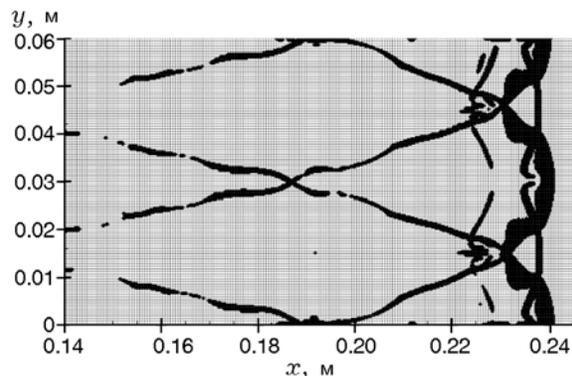


Рис. 7. Фрагмент расчетной сетки

ности в процессе расчета. Видно, что технология адаптации позволяет разрешить тонкую структуру детонационной ячейки. Можно отметить, что после адаптации (в зонах высокого градиента) размер расчетной ячейки составлял  $1/16 \div 1/64$  мм. На рис. 8 показаны поле плотности и изолинии давления. Расчет выполнен с помощью упрощенной схемы химической кинетики. Из рисунка можно сделать вывод, что выбранное сочетание математической модели и численных аспектов решателя позволяет увидеть все особенности ячеистой детонации.

На рис. 9 приведено поле максимумов давления в зависимости от времени. Оно позволяет судить о размере детонационной ячейки при данных параметрах смеси. Размер ячейки в расчете, примерно 30 мм, соответствует экспериментальным данным [28] — 26 мм.

На рис. 10 показано поле максимумов давления в зависимости от времени, полученное в расчетах с детальной кинетикой [8]. Отметим, что ширина канала в данном случае в два раза меньше, чем в расчете с использованием приведенной кинетики (см. рис. 9). Из рис. 10 видно, что хотя расчет воспроизводит двумерную поперечную неоднородность детонационной волны, однако выбранной разрешающей способности сетки недостаточно для хорошего разрешения структуры детонационной ячейки. Требуется провести расчет с более подробной сеткой.

## ВЫВОДЫ

1. Разработана модель приведенной кинетики для описания детонации водорода в кислороде и воздухе с разбавителями. Верификация по зависимости времени задержки воспламенения от температуры и давления и по зависимости скорости детонационной волны от

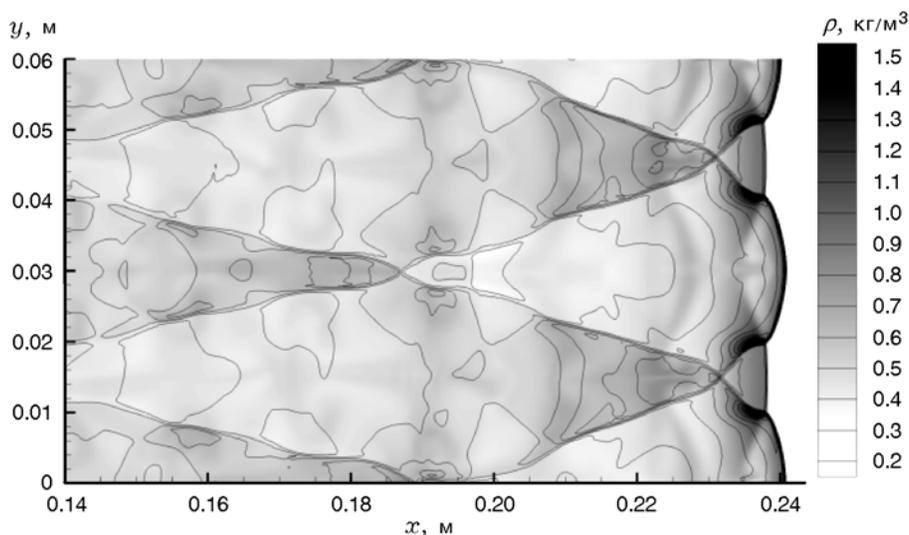


Рис. 8. Поле плотности и изолинии давления

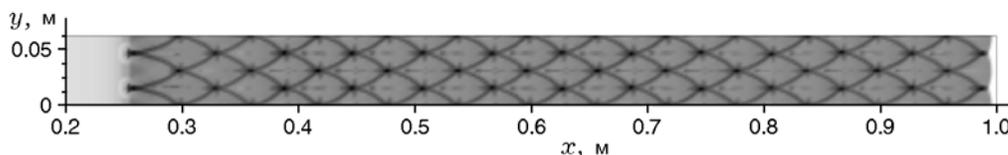


Рис. 9. Поле максимумов давления в зависимости от времени. Приведенная кинетика

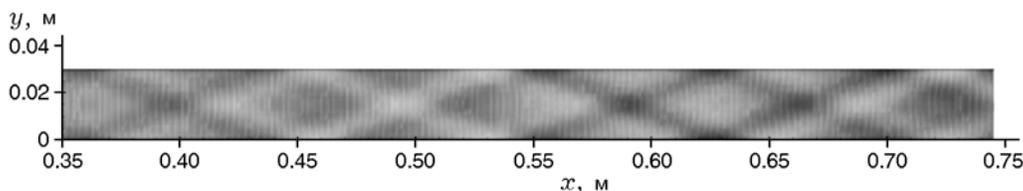


Рис. 10. Поле максимумов давления в зависимости от времени. Детальная кинетика

содержания разбавителя позволила определить кинетические параметры модели.

2. Показано, что две рассмотренные схемы детальной кинетики воспламенения и горения водородовоздушных смесей хорошо воспроизводят задержку воспламенения в диапазоне температуры  $1\,100 \div 2\,700$  К и менее точно в низкотемпературной области  $900 \div 1\,100$  К.

3. Численными расчетами установлено, что данные кинетические схемы также адекватно воспроизводят скорость распространения детонационной волны в этих смесях с аргоном и азотом.

4. Разработан программный модуль в системе ANSYS Fluent для расчета ячеистых детонационных течений с использованием приведенной и детальной кинетик.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Федоров А. В., Тропин Д. А., Бедарев И. А. Математическое моделирование подавления детонации водородокислородной смеси инертными частицами // Физика горения и взрыва. — 2010. — Т. 46, № 3. — С. 103–115.
2. Коробейников В. П., Левин В. А. Сильный взрыв в горючей смеси газов // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. — 1969. — № 6. — С. 48–51.
3. Николаев Ю. А., Зак Д. В. Согласование моделей химических реакций со вторым началом термодинамики // Физика горения и взрыва. — 1988. — Т. 24, № 4. — С. 87–90.
4. Николаев Ю. А., Фомин П. А. О расчете равновесных течений химически реагирующих газов // Физика горения и взрыва. — 1982. — Т. 18, № 1. — С. 66–72.

5. **Димитров В. И.** Простая кинетика. — Новосибирск: Наука, 1982.
6. **Chung K. Law.** Combustion Physics. — Cambridge Univ. Press, 2006.
7. **Бедарев И. А., Фёдоров А. В.** Сравнительный анализ трех математических моделей воспламенения водорода // Физика горения и взрыва. — 2006. — Т. 42, № 1. — С. 26–33.
8. **Tien J. H., Stalker R. J.** Release of chemical energy by combustion in a supersonic mixing layer of hydrogen and air // Combust. Flame. — 2002. — V. 131, N 3. — P. 329–348.
9. **Даутов Н. Г., Старик А. М.** К вопросу о выборе кинетической схемы при описании детонации в смеси  $H_2 + \text{воздух}$  за ударными волнами // Теплофизика высоких температур. — 1993. — Т. 31, № 2. — С. 292–301.
10. **Hidaka Y., Sato K., Henmi Y., Tanaka H., Inami K.** Shock-tube and modeling study of methane pyrolysis and oxidation // Combust. Flame. — 1999. — V. 118, N 3. — P. 340–358.
11. **Schott G. L., Kinsey J. L.** Kinetic studies of hydroxyl radicals in shock waves. II. Induction times in the hydrogen-oxygen reactions // J. Chem. Phys. — 1958. — N 29. — P. 1177–1188.
12. **Petersen E. L., Kalitan D. M., Rickard M. J. A.** Chemical kinetics of  $OH^*$  chemiluminescence in high-temperature reacting flows // Proc. of the Third Joint Meeting of the U. S. Sections of the Combustion Institute Chicago, Illinois, USA. — Papers C25/PL05. — 2003.
13. **Cheng R. K., Oppenheim A. K.** Autoignition in methane-hydrogen mixtures // Combust. Flame. — 1984. — V. 58, N 2. — P. 125–139.
14. **Blumenthal R., Fieweger K., Komp K. H., Adomeit G., Gelfand B. E.** Self-ignition of  $H_2/\text{air}$  mixtures at high pressure and low temperature // Proc. of the 20th Inter. Symp. on Shock Waves. — 1995. — P. 935–940.
15. **Blumenthal R.** Experimentelle Untersuchung und numerische Simulation der Selbstzündung von Kraftstoff/Luft-Gemischen im Stoßwellenrohr unter Berücksichtigung strömungsmechanischer // Einflüsse: Doctoral thesis / Inst. für Allgemeine Mechanik. — RWTH Aachen, 1996. — S. 44.
16. **Slack M. W.** Rate coefficient for  $H + O_2 + M = HO_2 + M$  valuated from shock tube measurements of induction times // Combust. Flame. — 1977. — V. 28. — P. 241–249.
17. **Bhaskaran K. A., Gupta M. C., Just Th.** Shock tube study of the effect of unsymmetric dimethyl hydrazine on the ignition characteristics of hydrogen-air mixtures // Combust. Flame. — 1973. — V. 21, N 1. — P. 45–48.
18. **Slack M., Grillo A.** Investigation of hydrogen-air ignition sensitized by nitric oxide and by nitrogen dioxide // NASACR-2896. — 1977.
19. **Akbar R.** Mach reflection of gaseous detonations: PhD thesis / Rensselaer Polytechnic Inst. — Troy, New York, USA, 1997.
20. **Schultz E., Shepherd J.** Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation // Graduate Aeronaut. Lab. California Inst. of Technol. Pasadena. — CA 91125. — February 8, 2000.
21. **Льюис Б., Эльбе Г.** Горение пламя и взрывы в газах. — 2-е изд. — М.: Мир, 1968.
22. **Fickett W., Wood W. W.** Flow calculations for pulsating one-dimensional detonations // Phys. Fluids. — 1966. — V. 9, N 5.
23. **Медведев С. А.** Об ослаблении пересжатых детонационных волн с конечной скоростью реакции // Механика жидкости и газа. — 1969. — № 3.
24. **Левин В. А., Марков В. В.** Возникновение детонации при концентрированном подводе энергии // Физика горения и взрыва. — 1975. — Т. 11, № 4. — С. 623–633.
25. **Бедарев И. А., Фёдоров А. В.** Тестирование метода адаптивных сеток на расчетах одномерных детонационных волн // Вычислит. технологии. — 2009. — Т. 14, № 3. — С. 14–24.
26. **Oran E. S., Weber J. W., Stefaniw E. I., Lefebvre M. H., Anderson J. D.** A numerical study of a two-dimensional  $H_2-O_2-Ar$  detonation using a detailed chemical reaction model // Combust. Flame. — 1998. — V. 113, N 1-2. — P. 147–163.
27. **Троцюк А. В.** Численное моделирование структуры двумерной газовой детонации смеси  $H_2-O_2-Ar$  // Физика горения и взрыва. — 1999. — Т. 35, № 5. — С. 93–103.
28. **Strehlow R. A., Liangminas R., Watson R. H., Eymann J. R.** Transverse wave structure in detonations // 11th Symp. Intern. Combust. Proc. — 1967. — P. 683–692.

Поступила в редакцию 23/V 2014 г.