

УДК 534.222.2:544.45

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯЧЕИСТОЙ СТРУКТУРЫ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В БИНАРНОЙ МЕТАНОВОДОРОДНОЙ СМЕСИ

А. В. Троцюк, П. А. Фомин

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск,
trotsyuk@hydro.nsc.ru, fomin@hydro.nsc.ru

Предложена обобщенная двустадийная модель химической кинетики детонационного горения бинарной стехиометрической смеси метана с водородом и воздухом. Она позволяет вычислять тепловыделение химической реакции, молярную массу, внутреннюю энергию и показатель адиабаты смеси без расчета ее детального химического состава, что существенно упрощает кинетические расчеты и сокращает их объем по сравнению с детальной кинетикой. Модель физически обоснована и не содержит подгоночных параметров. Для рассматриваемой смеси сделан численный двумерный расчет многофронтной структуры детонационной волны при вариации соотношения между горючими. Химические превращения описывались по предложенной кинетической модели. Рассчитанный размер детонационной ячейки, а также качественная структура детонационной волны (наличие областей несгоревшего газа в зоне реакции и нерегулярность ячеистой структуры, обусловленная формированием как основных, так и второстепенных поперечных волн) хорошо соответствуют эксперименту.

Ключевые слова: двухтопливная смесь, метан, водород, модель кинетики, детонация, численный расчет, многофронтная структура, детонационная ячейка, нерегулярная структура.

DOI 10.15372/FGV2024.9477
EDN TMGZKU

ВВЕДЕНИЕ

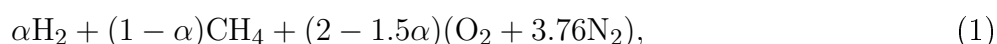
Бинарная (двухтопливная) газовая смесь метан/водород/воздух рассматривается в качестве перспективного топлива для ракетных двигателей на основе непрерывной вращающейся детонации [1–4]. Их разработка и оптимизация невозможны без проведения численных расчетов многофронтной структуры детонационной волны (ДВ), в том числе расчета поперечного размера детонационной ячейки a_0 — одного из основных параметров, характеризующих детонационные свойства газовой смеси [5].

Оценка размера детонационной ячейки в двухтопливной метановодородной смеси сделана в [6] по алгебраической формуле Васильева — Николаева, приведенной в [5]. Однако до сих пор не проведено численного двумерного расчета параметров и ячеистой структуры ДВ в двухтопливной метановодородной смеси при различных соотношениях между горючими. Представленные в литературе двумерные расчеты ограничиваются лишь однотопливными смесями водород — воздух и метан — воздух (см., например, [7, 8]). Это сдерживает расчет параметров непрерывного детонационного двигателя, использующего горение рассматриваемой бинарной смеси.

Численное моделирование параметров и структуры ДВ невозможно без учета химических превращений. От них зависят внутренняя энергия, тепловыделение, молярная масса и показатель адиабаты смеси. Большое число кинетических констант, проблема их

верификации на расчетах детонационных структур, значительные объемы кинетических вычислений служат серьезным (а порой и непреодолимым) препятствием на пути использования детальных кинетических схем для численного моделирования ДВ в углеводородовоздушных газовых смесях. Поэтому, несмотря на то, что растет число работ, в которых численные расчеты газовой детонации выполнены с использованием детальной кинетики (см., например, [9–11]), в подобного рода задачах широко используются и обобщенные кинетические модели (например, [7, 8, 12, 13]). Они позволяют находить один или несколько параметров: внутреннюю энергию, молярную массу, показатель адиабаты, тепловой эффект реакции — без расчета детального химического состава смеси. Это упрощает кинетические расчеты и значительно сокращает их объем, но при этом позволяет доводить до конкретных результатов численные многомерные расчеты сложных детонационных течений.

В данной работе сформулирована простая и физически обоснованная обобщенная модель детонационной химической кинетики для стехиометрической бинарной метановодородовоздушной смеси:



где α — молярная доля водорода, рассчитанная по сумме горючих компонентов, $0 \leq \alpha \leq 1$. За основу взята обобщенная кинетическая модель для однопаливной смеси метана с окислителем [7, 14], которая доказала свою высокую точность в рамках двумерных численных расчетов параметров и ячейистой структуры ДВ. Цель работы — показать, что предлагаемая модель кинетики обладает тем же набором достоинств, что и модель [7, 14]. При $\alpha = 0$ и $\alpha = 1$ смесь (1) соответствует однопаливным метановоздушной и водородовоздушной смесям.

Следующим этапом данного исследования являются численные двумерные расчеты многофронтной ДВ в смеси (1) при нескольких соотношениях между горючими. Химические превращения описаны по предлагаемой кинетической модели. Без ее использования подобного рода численные расчеты ДВ были бы затруднительны. Хорошее соответствие результатов расчета размера детонационной ячейки a_0 и качественной структуры ДВ имеющемуся эксперименту [15–20] свидетельствует о возможности использования предлагаемой кинетической модели в рамках численного моделирования детонационных структур, в том числе при расчете динамики ДВ в каналах сложной геометрии и параметров непрерывного детонационного двигателя на бинарной метановодородной смеси.

Ячейистая структура в стехиометрической метановоздушной смеси сильно нерегулярна [7, 19]. Размер детонационных ячеек на поверхности следовых отпечатков меняется по пространству хаотичным образом. Структура ДВ включает в себя несимметричные между собой и неодинаковые по амплитуде основные поперечные волны (ПВ), набор уменьшающихся по амплитуде вторичных (третичных и т. д.) волн, островки несгоревшего газа в зоне реакции. Некоторые основные ПВ могут иметь свою собственную, так называемую «тонкую» структуру фронта, образуемую системой ПВ на фронте самих основных ПВ. Степень нерегулярности ячейистой структуры при уменьшении доли водорода α растет [16–18]. Отметим, что это качественная экспертная оценка, основанная на сравнении следовых отпечатков. Количественного критерия степени нерегулярности не выработано. Ячейистая структура ДВ в стехиометрической водородовоздушной смеси близка к регулярной [16–18, 20]. Таким образом, изменение α в смеси (1) от 0 к 1 приводит к перестройке детонационной структуры. Исследование подобной эволюции представляет самостоятельный научный интерес. Соответствующая информация может быть получена при анализе результатов, установленных в численных расчетах детонационных структур.

ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ КИНЕТИКИ ГОРЕНИЯ МЕТАНОВОДОРОДНОЙ СМЕСИ В ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЕ

В [7, 14] сформулирована (и успешно верифицирована в рамках двумерного численного расчета многофронтной структуры ДВ) обобщенная двустадийная модель химической кинетики детонационного сгорания метана. Она является расширением модели [21] для водородокислородных смесей.

Опишем кратко модель [7, 14] и возьмем ее за основу при формулировании обобщенной кинетической модели для двухтопливной смеси (1). При $\alpha = 0$ предлагаемая модель совпадает с моделью [7, 14], а при $\alpha = 1$ — с моделью [21].

Химическая реакция разделяется на две стадии: период индукции и основное тепловыделение. Газ полагается идеальным.

Для расчета периода индукции τ_i применяется критерий [5, 22], широко используемый в численном моделировании ячеистой структуры ДВ. Он позволяет учесть пространственное и временное непостоянство параметров потока за фронтом ДВ. В зоне индукции вычисляется параметр индукции Y :

$$Y(t) = \int_0^t \frac{dt}{\tau}, \quad (2)$$

где t — время, $\tau = \tau(\rho, T)$ — период индукции при постоянных плотности ρ и температуре T , $Y(t = 0) = 1$. Момент истечения времени индукции $t = \tau_i$ определяется соотношением $Y(t = \tau_i) = 1$. В рамках настоящего численного моделирования применялся дифференциальный вариант данного критерия. В систему двумерных уравнений Эйлера для сжимаемого газа добавлено дополнительное дифференциальное уравнение для параметра индукции Y :

$$\frac{\partial \rho Y}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Y}{\partial x} + \frac{\partial \rho v Y}{\partial y} = \frac{\rho}{\tau},$$

где u, v — компоненты скорости в направлении осей x и y соответственно. В начальный момент времени $Y = 0$, при $Y \geq 1$ период индукции считается завершенным в данной расчетной ячейке. Молярная масса смеси μ при этом рассчитывается из приведенного ниже дифференциального кинетического уравнения при начальном условии $\mu = \mu_*$, где μ_* — молярная масса смеси в момент завершения периода индукции.

Реальные многостадийные процессы в течение периода индукции заменяются брутто-реакцией, удовлетворяющей следующим условиям. Во-первых, суммарное тепловыделение к моменту окончания периода индукции много меньше максимально возможного теплового эффекта, соответствующего полной рекомбинации продуктов реакции. Во-вторых, метан за время периода индукции полностью разлагается с образованием СО и ОН. С учетом приведенных условий полагалось, что в зоне индукции все молекулы метана рано или поздно участвуют в реакции $\text{CH}_4 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{OH} + 1.5\text{H}_2$. Далее вводится доля молекул метана β , не претерпевших разложения к некоторому моменту времени внутри зоны индукции, $\beta = 1$ в начале индукционной зоны ($Y = 0$) и $\beta = 0$ в конце нее ($Y = 1$). С учетом интенсификации химических превращений в конце периода индукции предложена следующая формула для расчета доли молекул метана: $\beta = 1 - Y$. Брутто-реакция и формулы для расчета Y и β позволяют в рамках явных алгебраических формул определить детальный химический состав смеси в любой момент времени внутри зоны индукции и, соответственно, рассчитать молярную массу смеси, а также химическую часть ее внутренней энергии по табличным значениям энергии образования отдельных компонентов [23].

Полагалось, что химический состав метановоздушной смеси в зоне основного тепло-выделения (а также при химическом равновесии) состоит из H, O, OH, H₂, O₂, H₂O, CO, CO₂, N₂. Молярная масса газа рассчитывалась по кинетическому уравнению

$$\frac{d\mu}{dt} = 4K_+ \frac{\rho^2}{\mu} \left(1 - \frac{\mu}{\mu_{max}}\right)^2 - AT^{3/4} \left(1 - \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right)\right)^{3/2} \rho \left(\frac{\mu}{\mu_{min}} - 1\right) \exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \quad (3)$$

Химическая часть внутренней энергии при этом вычислялась по алгебраической формуле

$$U_{chem}(\mu) = E \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{min}}\right). \quad (4)$$

Термодинамическая часть внутренней энергии смеси и в зоне индукции, и в зоне основного тепловыделения рассчитывалась по формуле

$$U_{therm}(T, \mu) = \left[\frac{3}{4} \left(\frac{\mu}{\mu_a} + 1\right) + \frac{3}{2} \left(\frac{\mu}{\mu_a} - 1\right) \frac{\theta/T}{\exp(\theta/T) - 1} \right] \frac{RT}{\mu}. \quad (5)$$

Полная внутренняя энергия газа U есть сумма ее термодинамической и химической частей:

$$U(T, \mu) = U_{therm}(T, \mu) + U_{chem}(\mu). \quad (6)$$

В формулах (3)–(6) E — средняя энергия диссоциации продуктов реакции, A и K_+ — обобщенные константы скоростей рекомбинации и диссоциации, θ — эффективная температура возбуждения колебательных степеней свободы молекул, μ_a , μ_{min} и μ_{max} — молярные массы газа в атомарном, предельно диссоциированном и рекомбинированном состояниях соответственно. Алгоритм вычисления констант E , A , K_+ , θ , μ_a , μ_{min} и μ_{max} представлен в [7, 14].

Таким образом, модель [7, 14] позволяет рассчитать входящие в уравнения Эйлера молярную массу и внутреннюю энергию газа с помощью набора алгебраических формул и всего одного обыкновенного дифференциального кинетического уравнения (3).

Модель [7, 14] применима и для расчета μ и U в состоянии химического равновесия. Для этого в кинетическом уравнении (3) следует положить производную молярной массы по времени равной нулю. В результате получается алгебраическое (квадратное относительно μ) уравнение химического равновесия $\mu = \mu(\rho, T)$:

$$\frac{\rho}{\mu} \left(1 - \frac{\mu}{\mu_{max}}\right)^2 / \left(\frac{\mu}{\mu_{min}} - 1\right) T^{-3/4} \left(1 - \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right)\right)^{-3/2} \exp\left(\frac{E}{RT}\right) = \frac{A}{4K_+}. \quad (7)$$

Формулы (4)–(6) при этом остаются без изменений.

Обобщим кинетическую модель [7, 14] на двухтопливную метановодородную смесь (1). Положим, что во время периода индукции имеет место аналогичная [7, 14] брутто-реакция постепенного разложения метана. При этом изначально присутствующий в двухтопливной смеси водород в брутто-реакции участия не принимает. Тогда химический состав смеси в произвольный момент времени в зоне индукции имеет вид

$$(1 - \alpha) \beta \text{CH}_4 + [(1 - \alpha) \beta + 1 - 0.5\alpha] \text{O}_2 + (1 - \alpha)(1 - \beta)(\text{CO} + \text{OH}) + \\ + [1.5(1 - \alpha)(1 - \beta) + \alpha] \text{H}_2 + (2 - 1.5\alpha) 3.76\text{N}_2. \quad (8)$$

Все остальные предположения модели [7, 14] о химическом превращении оставим без изменения. Таким образом, формулы (2)–(7), как и алгоритм входящих в модель констант, будут справедливы и для смеси (1).

Чтобы воспользоваться (2), период индукции τ в рассматриваемой двухтопливной смеси будем рассчитывать по формуле, предложенной в [24]:

$$\tau = \tau_{\text{H}_2}^\alpha \tau_{\text{CH}_4}^{1-\alpha}.$$

Здесь τ_{H_2} и τ_{CH_4} — периоды индукции в однотопливных смесях водород — воздух и метан — воздух, вычисляемые по формулам [25, 26] и [27] соответственно:

$$\tau_{\text{H}_2} = \frac{A_{\text{H}_2}}{[\text{O}_2]} \exp \frac{E_{\text{H}_2}}{RT},$$

$$\tau_{\text{CH}_4} = \frac{A_{\text{CH}_4}}{[\text{O}_2]} \exp \frac{E_{\text{CH}_4}}{RT},$$

где $[\text{O}_2]$ — концентрация кислорода перед фронтом волны, моль/м³, $A_{\text{H}_2} = 24.83 \cdot 10^{-8}$ моль · с/м³, $E_{\text{H}_2} = 71\,816$ Дж/моль, $A_{\text{CH}_4} = 6.0 \cdot 10^{-9}$ моль · с/м³, $E_{\text{CH}_4} = 139\,001$ Дж/моль.

Константы модели E , A , K_+ , θ , μ_a , $\mu_{\min}$ и $\mu_{\max}$ рассчитывались для каждого значения α в соответствии с алгоритмом, представленным в [7, 14]. Например, при $\alpha = 0.6$ получено: $\mu_a = 16.63 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, $\mu_{\min} = 17.36 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, $\mu_{\max} = 26.72 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, $A = 5.1 \cdot 10^8$ м³ · К^{-3/4}/(моль · с), $E = 4.6731 \cdot 10^5$ Дж/моль, а при $\alpha = 0.8$ — $\mu_a = 15.90 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, $\mu_{\min} = 16.35 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, $\mu_{\max} = 26.00 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, $A = 3.384 \cdot 10^8$ м³ · К^{-3/4}/(моль · с), $E = 4.6407 \cdot 10^5$ Дж/моль. Согласно [7, 14, 21] константы K_+ и θ от начального состава смеси не зависят: $K_+ = 0.6 \cdot 10^3$ м⁶/(моль² · с), $\theta = 4\,000$ К.

Отметим, что предлагаемая кинетическая модель покрывает весь диапазон соотношений между горючими: $0 \leq \alpha \leq 1$. Она обладает той же совокупностью достоинств, что и модели [7, 14, 21]. То есть она проста (только одно дифференциальное кинетическое уравнение вместо громоздкой системы жестких обыкновенных дифференциальных уравнений при использовании детальной кинетики), физически обоснована, соответствует второму началу термодинамики и принципу Ле Шателье, отличается (как показали приведенные ниже расчеты) хорошей точностью в рамках описания химических превращений при численных расчетах многофронтовых детонационных структур.

Особо подчеркнем, что верификацию предлагаемой модели следует проводить в рамках численных расчетов структуры ДВ (в том числе на расчетах размера детонационной ячейки), а не путем ее сравнения с детальными кинетическими расчетами, поскольку их адекватность реальным химическим превращениям за фронтом реальной ДВ не проверялась.

Для дополнительного подтверждения работоспособности предлагаемой кинетической модели выполнен расчет параметров одномерной стационарной детонации Чепмена — Жу́ге (ЧЖ) в смеси (1) при $\alpha = 0, 0.6, 0.8$ и 1. Состояние газа в точке ЧЖ полагалось химически равновесным. Используемые уравнения аналогичны приведенным в [21]. Проведено сравнение с соответствующим расчетом параметров ДВ, в котором используется детальная система уравнений химического равновесия и вычисляется детальный химический состав газовой смеси [28]. Разница по скорости детонации, температуре и молярной массе в плоскости ЧЖ не превышает 2 %.

ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ И РЕЗУЛЬТАТЫ ДВУМЕРНОГО РАСЧЕТА МНОГОФРОНТОВОЙ ЯЧЕИСТОЙ СТРУКТУРЫ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В МЕТАНОВОДОРОДНОЙ СМЕСИ

Система уравнений, начальные и граничные условия, математические методы и алгоритм расчета параметров и структуры ДВ, использованные в настоящей работе, аналогичны изложенным в [7, 8, 14, 26].

Прямое инициирование ДВ обеспечивалось мгновенным энерговыделением (скачком давления и температуры) в квадратной области у левой закрытой стенки плоского канала. Размер и энергия источника инициирования были заведомо достаточны для возбуждения незатухающей ДВ, т. е. реализовывался сверхкритический режим инициирования. Их минимально необходимые значения не вычислялись. Численный расчет прекращался после того, как волна, вышедшая на стационарный (в среднем) режим распространения, проходила дистанцию не менее десяти калибров. Фронт волны при этом успевал пройти расстояние в несколько десятков калибров от места инициирования (от пятидесяти до ста).

Размер детонационной ячейки a_0 принимался равным такой ширине канала, при которой после выхода волны на стационарный (в среднем) режим детонационная структура включала в себя две основные максимально симметричные ПВ, движущиеся в противоположных направлениях по поперечной координате. Построение двумерных численных следовых отпечатков не проводилось.

При численном решении системы уравнений применялась адаптивная подвижная структурированная многозонная сетка с локальным измельчением по продольной координате в окрестности переднего фронта ДВ. Общее число ячеек расчетной сетки по осям x и y равнялось N_x и N_y соответственно. Значение $x = 0$ соответствовало левой границе расчетной области. Подвижная сетка по оси x состояла из равномерной и неравномерной частей. Равномерная сетка содержала N_{x1} ячеек размером h_x , охватывала область течения с большими градиентами параметров в окрестности ведущего ударного фронта ДВ и перемещалась вместе с ним. Оставшиеся $N_{x2} = N_x - N_{x1}$ ячеек образовывали неравномерную сетку, которая заполняла расчетную область от $x = 0$ до начала равномерной сетки. По оси y использовалась равномерная неподвижная сетка с размером расчетной ячейки $h_y = H/N_y$, где H — поперечный размер канала. Как правило, выбиралось $h_y = h_x$. Основные расчеты сделаны при $N_x = 2000$, $N_{x1} = 1750$, $N_y = 2000$.

Для определения поперечного размера ячейки, как правило, было достаточно выполнить 3–4 итерации по ширине канала для смесей с регулярной ячеистой структурой и до 6–8 итераций для нерегулярной структуры ДВ.

Вариация ширины канала на 10 % и более относительно рассчитанного размера ячейки приводила к заметному нарушению симметрии между основными ПВ, исчезновению одной из них или образованию двух ПВ, движущихся в одном направлении. Соответственно, ошибка численного расчета a_0 в рамках проведенного моделирования, если не указано иное, не превышала 10 %.

Численные расчеты параметров и структуры ДВ проводились для смесей с $\alpha = 0, 0.6, 0.8$ и 1.0 при нормальных начальных условиях. Расчеты выполнены на пределе имеющих-

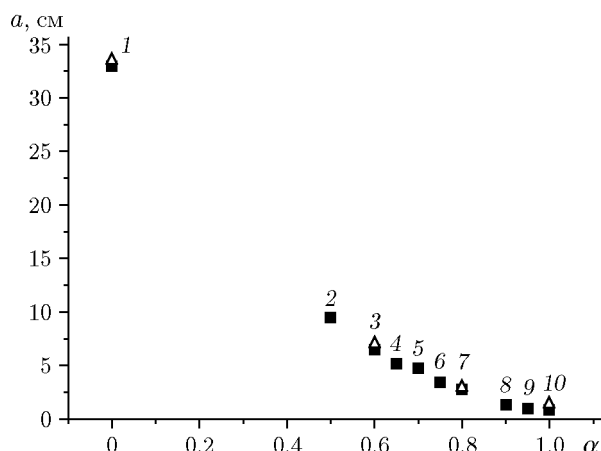


Рис. 1. Зависимость размера ячейки ДВ в смеси $\alpha\text{H}_2 + (1 - \alpha)\text{CH}_4 + (2 - 1.5\alpha)(\text{O}_2 + 3.76\text{N}_2)$ от соотношения между горючими: треугольники — настоящий расчет, квадраты — эксперимент: 1 — [19]; 2 — [15, 16]; 3, 6, 7, 10 — [16]; 4 — [18], 5 — [16, 18], 8 — [16–18], 9 — [17]

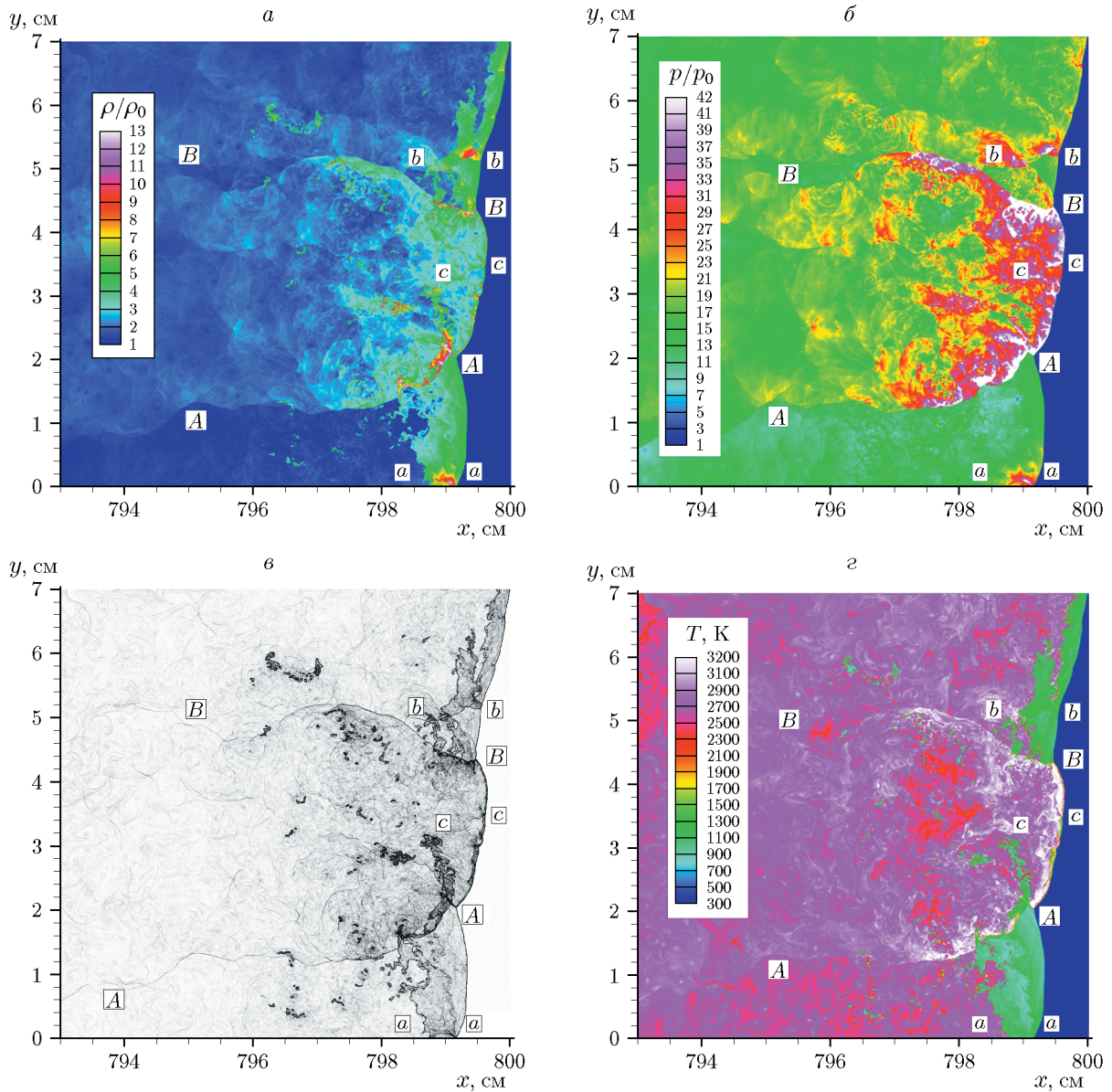


Рис. 2. Структура фронта детонационной волны в смеси $0.6\text{H}_2 + 0.4\text{CH}_4 + 1.1(\text{O}_2 + 3.76\text{N}_2)$, $\alpha = 0.6$, в канале шириной $H = a_0 = 7$ см; $x_{fr} = 800$ см:

a — поле нормализованной плотности, *б* — поле нормализованного давления, *в* — численная шпирен-визуализация, *г* — поле температуры

ся у авторов вычислительных возможностей. Этим обстоятельством обусловлено относительно небольшое число рассмотренных составов. В то же время расчеты покрывают весь диапазон изменения α .

На рис. 1 представлены расчетные и экспериментальные (без указания экспериментальной ошибки) размеры детонационной ячейки. Видно хорошее соответствие между ними.

Результаты расчета детонационных структур приведены на рис. 2–9, x_{fr} — расстояние от лидирующего ударного фронта до левой границы канала, ρ/ρ_0 — нормализованная плотность, p/p_0 — нормализованное давление, индексом 0 обозначены начальные параметры. ПВ выпуклы в сторону своего распространения.

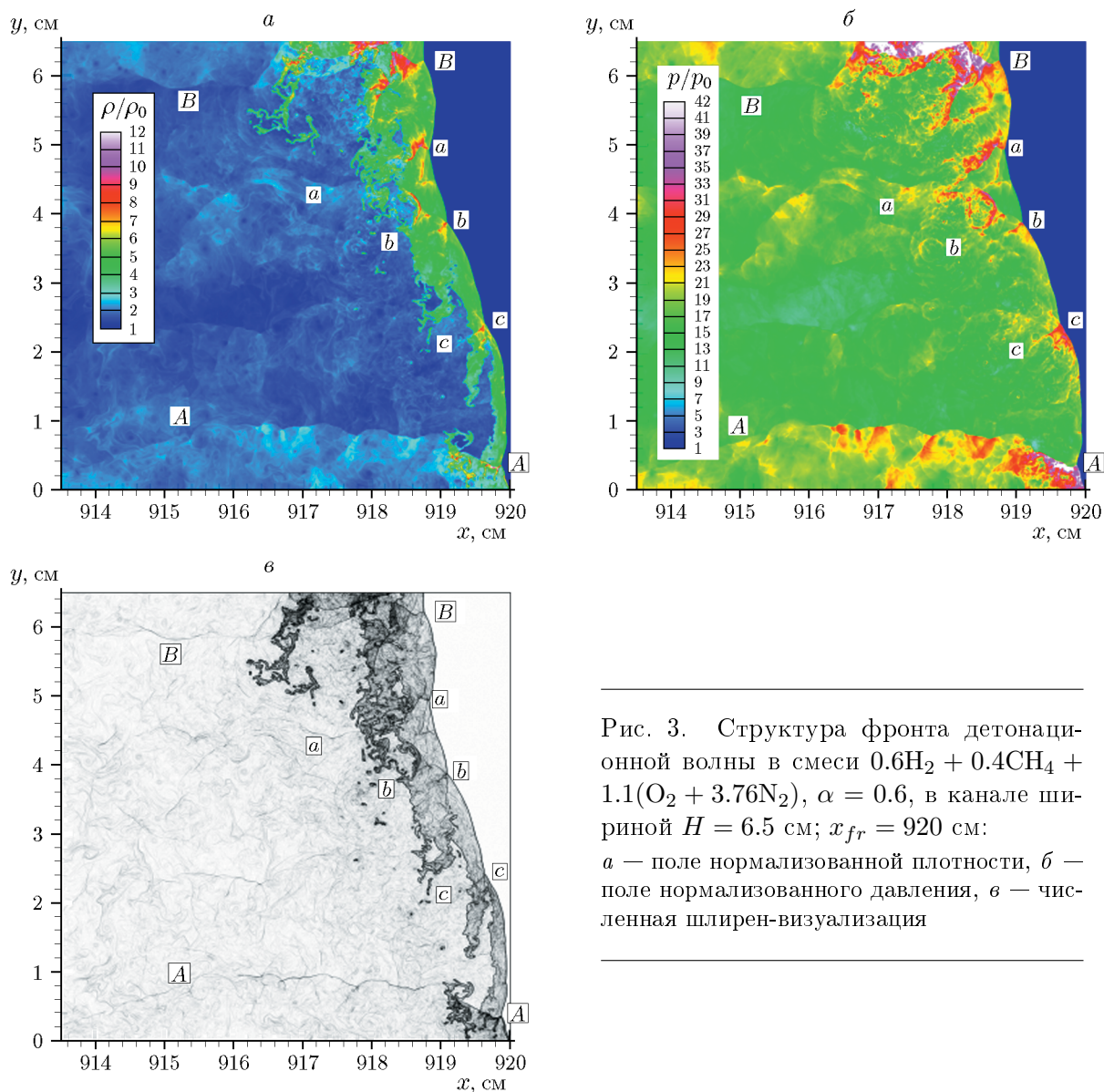


Рис. 3. Структура фронта детонационной волны в смеси $0.6\text{H}_2 + 0.4\text{CH}_4 + 1.1(\text{O}_2 + 3.76\text{N}_2)$, $\alpha = 0.6$, в канале шириной $H = 6.5$ см; $x_{fr} = 920$ см:
 а — поле нормализованной плотности, б — поле нормализованного давления, в — численная ширен-визуализация

Рис. 2–4 соответствуют смеси $0.6\text{H}_2 + 0.4\text{CH}_4 + 1.1(\text{O}_2 + 3.76\text{N}_2)$, $\alpha = 0.6$. На рис. 2 показан расчет при $a_0 = H = 7$ см. Расчетное значение a_0 хорошо соответствует эксперименту ($6.0 \div 6.5$ см [15, 16, 18]). Структура ДВ включает в себя две практически равные по интенсивности основные ПВ, обозначенные как AA и BB. Они движутся в противофазе по поперечной координате. Их положение относительно оси канала тоже довольно симметрично. Имеются и вторичные ПВ, некоторые из них обозначены как aa, bb и cc. Присутствуют еще более мелкие возмущения на фронте ДВ. В зоне реакции образуются и небольшие островки несгоревшего газа. Нерегулярность рассматриваемой многофронтной структуры ДВ проявляется в отсутствии строгой симметрии течения, наличии системы вторичных/третичных ПВ и небольших областей несгоревшего газа. Расчеты показывают, что в рассматриваемом канале режим ДВ с двумя основными ПВ устойчив. Более чем двукратное увеличение пройденного ДВ расстояния — от $x_{fr} = 348$ см до $x_{fr} = 800$ см — не приводит к какому-либо существенному изменению многофронтной структуры ДВ. Мелкие детали течения, такие как вторичные и еще более мелкие ПВ,

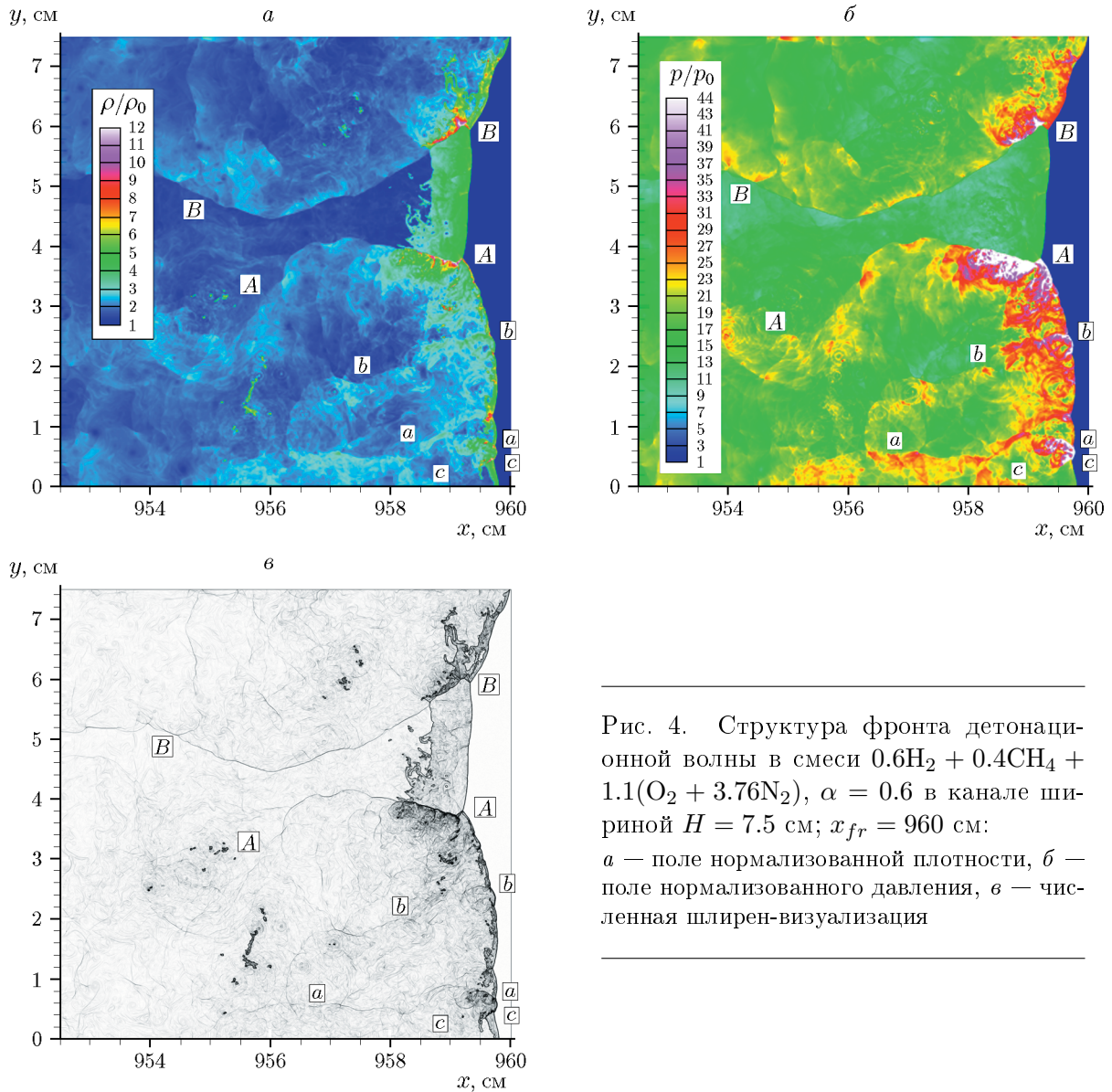


Рис. 4. Структура фронта детонационной волны в смеси $0.6\text{H}_2 + 0.4\text{CH}_4 + 1.1(\text{O}_2 + 3.76\text{N}_2)$, $\alpha = 0.6$ в канале шириной $H = 7.5$ см; $x_{fr} = 960$ см:
a — поле нормализованной плотности, *б* — поле нормализованного давления, *в* — численная ширин-визуализация

число и форма островков несгоревшего газа и т. д., конечно, по мере распространения ДВ с течением времени варьируются. Из сравнения рис. 2, 3 и 4 видно, что изменение высоты канала относительно размера ячейки на 0.5 см в ту и другую сторону приводит к потере симметричности при столкновении основных ПВ, а также к росту величины вторичных ПВ и увеличению их числа. Таким образом, в рамках проведенных расчетов поперечный размер детонационной ячейки для рассматриваемой смеси определен с ошибкой, не превышающей 8 %.

На рис. 5–7 показаны результаты расчета структуры ДВ в смеси $0.8\text{H}_2 + 0.2\text{CH}_4 + 0.8(\text{O}_2 + 3.76\text{N}_2)$, $\alpha = 0.8$. Ширина канала на рис. 5 равна поперечному размеру ячейки: $H = a_0 = 3.3$ см. Рассчитанный размер ячейки хорошо соответствует экспериментальным данным ($2.8 \div 3.3$ см [15, 16, 18]). Как и на рис. 2, имеются две приблизительно равные по интенсивности и протяженности основные ПВ — *AA* и *BB*. Но при этом они существенно несимметричны. Помимо них, имеется большое количество вторичных ПВ.

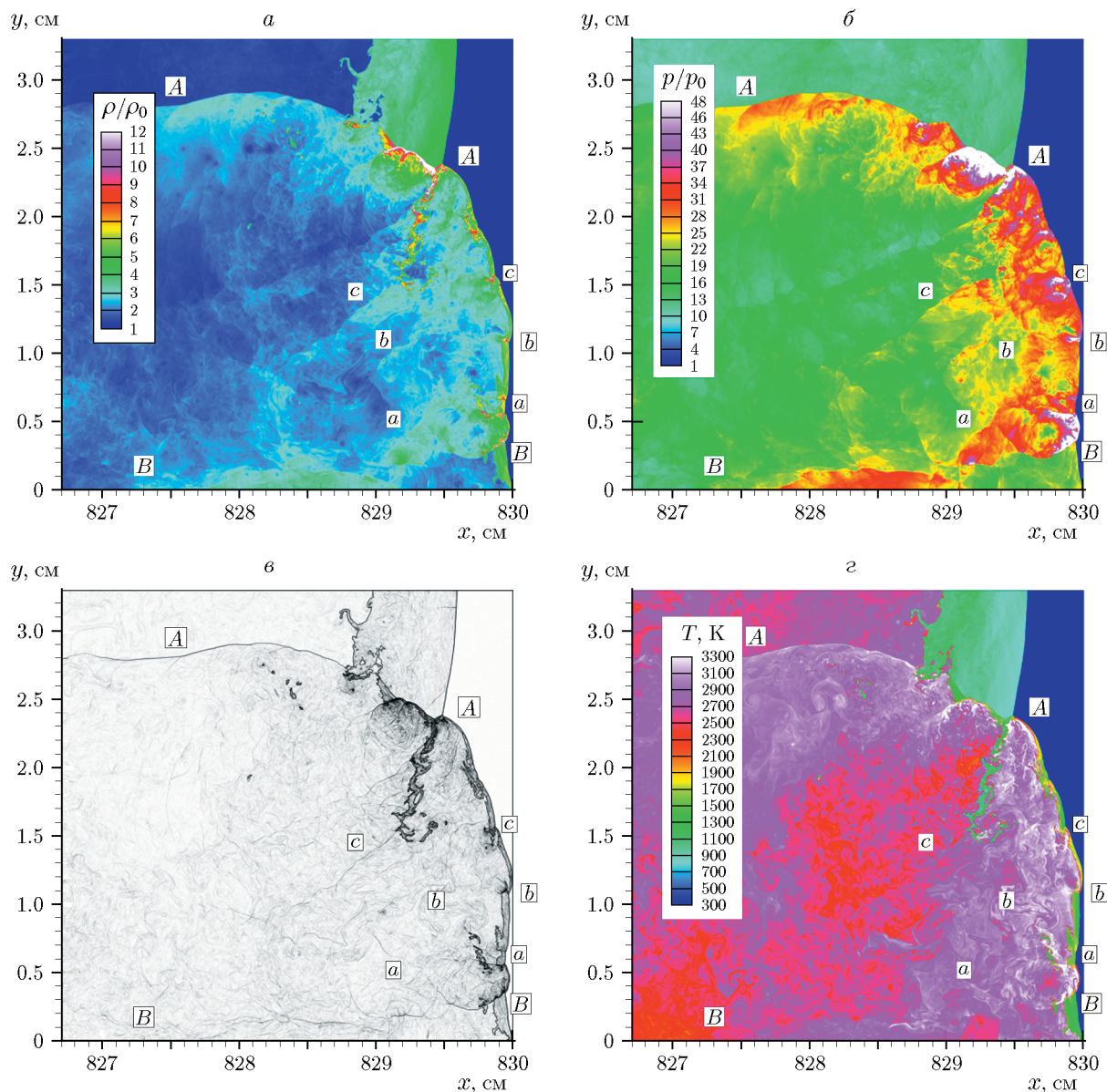


Рис. 5. Структура фронта детонационной волны в смеси $0.8\text{H}_2 + 0.2\text{CH}_4 + 0.8(\text{O}_2 + 3.76\text{N}_2)$, $\alpha = 0.8$ в канале шириной $H = a_0 = 3.3$ см, $x_{fr} = 830$ см:

a — поле нормализованной плотности, $б$ — поле нормализованного давления, $в$ — численная шпирен-визуализация, $г$ — поле температуры

Численные эксперименты показали, что в рассматриваемой смеси невозможно добиться полной симметрии основных ПВ при вариации ширины канала H . Это свидетельствует о значительной степени нерегулярности ячеистой структуры ДВ. Из рис. 6 и 7 видно, что даже незначительное изменение ширины канала в меньшую и большую сторону всего на 1.5 % относительно a_0 приводит к значительной деформации многофронтной структуры ДВ. То есть имеется своеобразный «резонанс» в отклике детонационной структуры на варьирование параметра H . Так, уменьшение H до 3.25 см (рис. 6) приводит к существенному ослаблению основной ПВ BB и значительному усилению волны AA . При этом она имеет «тонкую» структуру на своем фронте. При $H = 3.35$ см (рис. 7) явно видно значительное усиление одной из вторичных ПВ, обозначенной aa . По интенсивности и

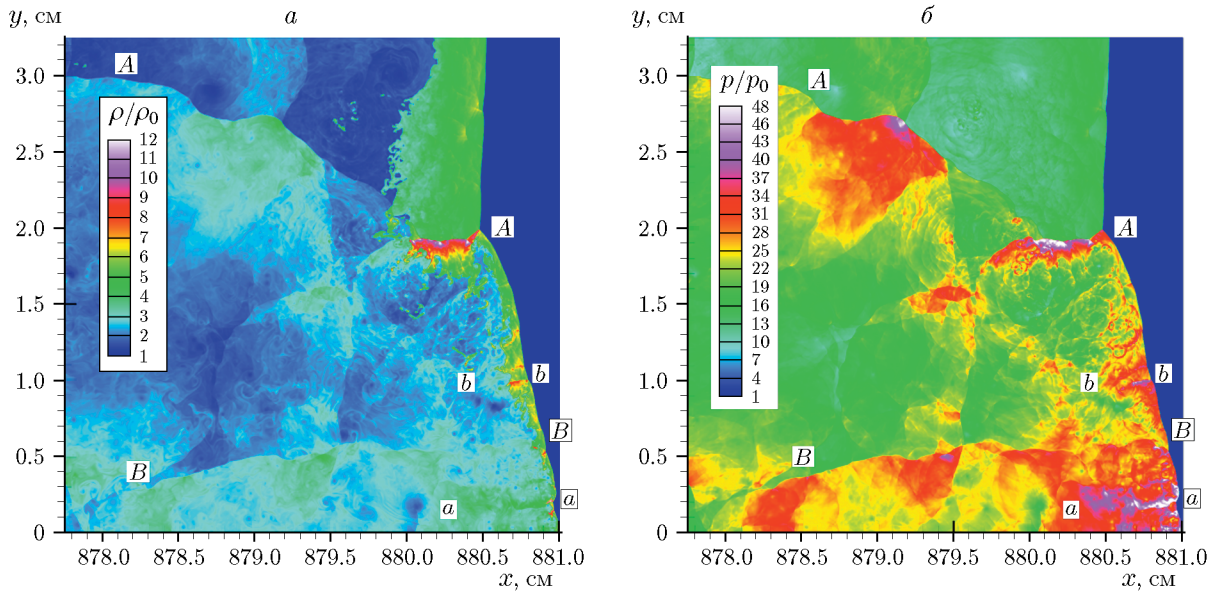


Рис. 6. Структура фронта детонационной волны в смеси $0.8\text{H}_2 + 0.2\text{CH}_4 + 0.8(\text{O}_2 + 3.76\text{N}_2)$, $\alpha = 0.8$, в канале шириной $H = 3.25$ см; $x_{fr} = 881$ см:

a — поле нормализованной плотности, b — поле нормализованного давления

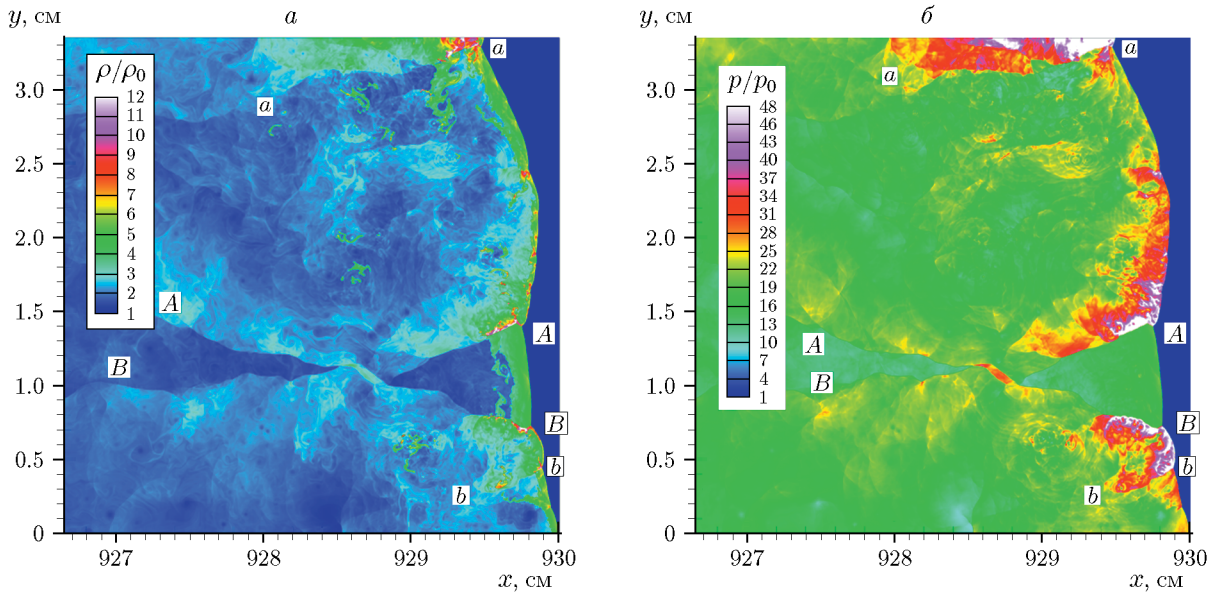


Рис. 7. Структура фронта детонационной волны в смеси $0.8\text{H}_2 + 0.2\text{CH}_4 + 0.8(\text{O}_2 + 3.76\text{N}_2)$, $\alpha = 0.8$, в канале шириной $H = 3.35$ см; $x_{fr} = 930$ см:

a — поле нормализованной плотности, b — поле нормализованного давления

протяженности она почти сравнялась с основными ПВ AA и BB , которые практически одинаковы по форме и интенсивности.

Из сравнения рис. 2 и 5 трудно сделать какой-либо однозначный вывод о различии в степени регулярности ячеистой структуры ДВ при изменении величины α от 0.6 до 0.8. Поскольку в стехиометрической водородовоздушной смеси ($\alpha = 1.0$) ячеистая структура ДВ близка к регулярной [16–18, 20], следует ожидать, что при увеличении α от 0.8 до 1.0 практически полная регуляризация детонационной структуры рано или поздно

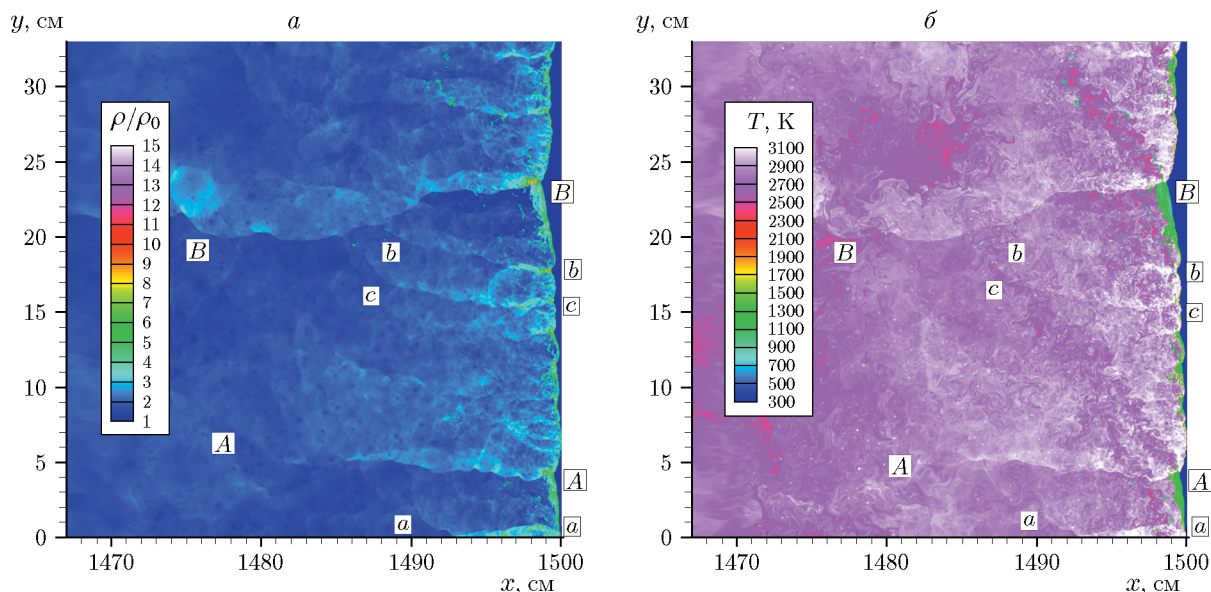


Рис. 8. Структура фронта детонационной волны в стехиометрической метановоздушной смеси $\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3.76\text{N}_2)$ в канале шириной $H = a_0 = 33$ см, $x_{fr} = 1500$ см:

a — поле нормализованной плотности, b — поле температуры

произойдет. Приведенные результаты расчета детонационных структур при $\alpha = 0.6$ и 0.8 резко контрастируют с результатами двумерного численного моделирования структуры ДВ в двухтопливной стехиометрической смеси оксида углерода (II) с водородом (синтез-газ) [26], согласно которым монотонное увеличение доли водорода ведет к монотонной регуляризации многофронтной структуры.

На рис. 8 показаны результаты расчета для $\alpha = 0$ (однотопливная стехиометрическая метановоздушная смесь). Размер детонационной ячейки $a_0 = H = 33$ см и качественная структура ДВ хорошо соответствуют эксперименту [19]. Аналогичные результаты расчетов получены ранее в [7]. Видно, что структура ДВ сильно нерегулярна. Это проявляется в сильной пространственной несимметрии основных ПВ AA и BB , наличии большого набора несимметричных и хаотично движущихся вторичных (третичных и т. д.) ПВ, в формировании областей несгоревшего газа в зоне реакции.

Результаты расчета для однотопливной стехиометрической водородовоздушной смеси ($\alpha = 1$) приведены на рис. 9. Размер ячейки $a_0 = H = 1.4$ см хорошо соответствует экспериментальным данным ($0.8 \div 1.0$ см [15–18], 1.4 см [20, 29]). Соответствует эксперименту и качественная структура ДВ. Она близка к регулярной: присутствуют две основные ПВ, движущиеся в противофазе по поперечной координате, приблизительно симметричные по пространству и примерно одинаковые по амплитуде, отсутствуют вторичные ПВ и островки несгоревшего газа.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена физически обоснованная обобщенная двустадийная модель детонационной химической кинетики бинарной стехиометрической смеси метана с водородом и воздухом. Она применима и для расчета состояния химического равновесия. Модель не требует большого количества вычислений и является альтернативой детальным кинетическим схемам в численных двумерных расчетах параметров и структуры детонационной волны.

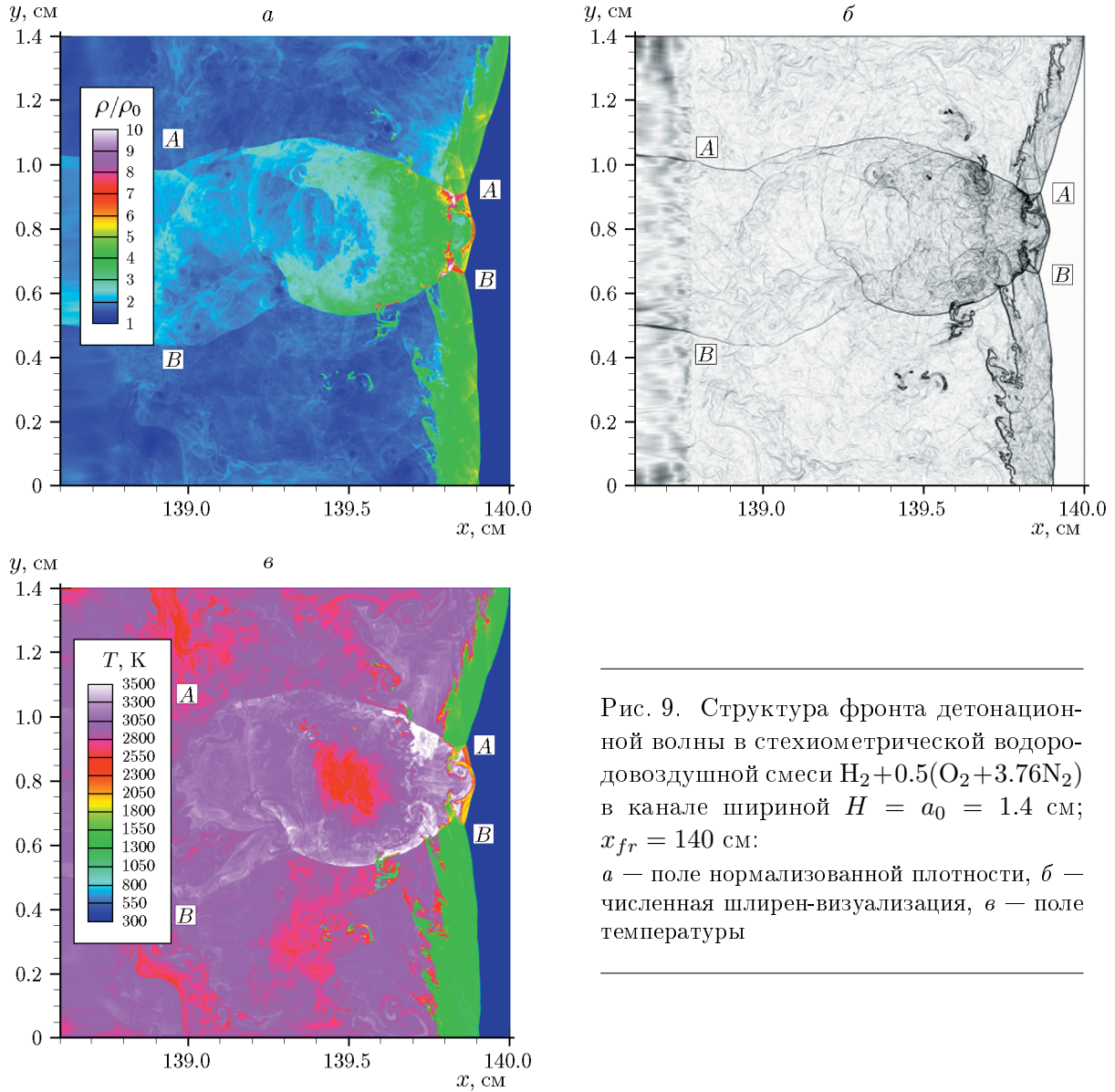


Рис. 9. Структура фронта детонационной волны в стехиометрической водородовоздушной смеси $\text{H}_2 + 0.5(\text{O}_2 + 3.76\text{N}_2)$ в канале шириной $H = a_0 = 1.4$ см; $x_{fr} = 140$ см:
 а — поле нормализованной плотности, б — численная шпирен-визуализация, в — поле температуры

Выполнен численный двумерный расчет многофронтной структуры детонационной волны в рассматриваемой бинарной смеси во всем диапазоне соотношений между горючими. Химические превращения описывались в рамках предложенной кинетической модели. Рассчитанный размер детонационной ячейки и качественная нерегулярная структура ДВ (несимметрия основных поперечных волн, формирование иерархии вторичных поперечных волн, наличие островков несгоревшего газа) хорошо соответствуют эксперименту. Это свидетельствует о возможности использования предлагаемой кинетической модели в рамках численного моделирования сложных детонационных структур, в том числе при расчете двигателей, основанных на вращающейся и пульсирующей детонации, отражении детонационной волны от наклонных поверхностей и ее дифракции на преградах.

Вычисления проведены с использованием комплекса MVS-10Q в Межведомственном суперкомпьютерном центре РАН, Москва.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках государственного задания Института гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН (номер госрегистрации № 121121600293-2).

ЛИТЕРАТУРА

1. **Быковский Ф. А., Ждан С. А.** Непрерывная спиновая детонация. — Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2013.
2. **Быковский Ф. А., Ждан С. А., Ведерников Е. Ф.** Непрерывная детонация смесей метан/водород — воздух в кольцевой цилиндрической камере сгорания // Физика горения и взрыва. — 2018. — Т. 54, № 4. — С. 96–106. — DOI: 10.15372/FGV20180411. — EDN: XRLJOX.
3. **Быковский Ф. А., Ждан С. А., Ведерников Е. Ф.** Параметры непрерывной детонации смесей метан/водород — воздух при добавлении воздуха в продукты сгорания // Физика горения и взрыва. — 2020. — Т. 56, № 2. — С. 83–94. — DOI: 10.15372/FGV20200211. — EDN: FZZPJG.
4. **Быковский Ф. А., Ждан С. А., Ведерников Е. Ф.** Непрерывная детонация смесей CH_4/H_2 — воздух при варьировании геометрии кольцевой камеры сгорания // Физика горения и взрыва. — 2020. — Т. 56, № 5. — С. 49–56. — DOI: 10.15372/FGV20200505. — EDN: FENVFF.
5. **Николаев Ю. А., Васильев А. А., Ульяницкий В. Ю.** Газовая детонация и ее применение в технике и технологиях (обзор) // Физика горения и взрыва. — 2003. — Т. 39, № 4. — С. 22–54. — EDN: ONUNQX.
6. **Васильев А. А., Васильев В. А.** Многотопливные системы метан — водород — водяной пар // Физика горения и взрыва. — 2021. — Т. 57, № 1. — С. 17–26. — DOI: 10.15372/FGV20210102. — EDN: DQZXZL.
7. **Fomin P. A., Trotsyuk A. V., Vasil'ev A. A.** Approximate model of chemical reaction kinetics for detonation processes in mixture of CH_4 with air // Combust. Sci. Technol. — 2014. — V. 186, N 10-11. — P. 1716–1735. — DOI: 10.1080/00102202.2014.935643.
8. **Троцюк А. В.** Численное моделирование структуры двумерной газовой детонации смеси $\text{H}_2\text{—O}_2\text{—Ar}$ // Физика горения и взрыва. — 1999. — Т. 35, № 5. — С. 93–103. — EDN: YGBAHV.
9. **Бедарев И. А., Рылова К. В., Федоров А. В.** Применение детальных и приведенных кинетических схем для описания детонации водородовоздушных смесей с разбавителем // Физика горения и взрыва. — 2015. — Т. 51, № 5. — С. 22–33. — DOI: 10.15372/FGV20150503. — EDN: UMUJFX.
10. **Борисов С. П., Кудрявцев А. Н., Шершнев А. А.** Сравнение детальных химических моделей горения водорода при численном моделировании детонации // Физика горения и взрыва. — 2021. — Т. 57, № 3. — С. 18–33. — DOI: 10.15372/FGV20210302. — EDN: OCILVE.
11. **Takeshima N., Ozawa K., Tsuboi N., Hayashi A. K., Morii Y.** Numerical simulations on propane/oxygen detonation in a narrow channel using a detailed chemical mechanism: formation and detailed structure of irregular cells // Shock Waves. — 2020. — V. 30. — P. 809–824. — DOI: 10.1007/s00193-020-00978-5.
12. **Tang-Yuk K. C., Mi X. C., Lee J. H. S., Ng H. D., Deiterding R.** Transmission of a detonation wave across an inert layer // Combust. Flame. — 2022. — V. 236. — 111769. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2021.111769.
13. **Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В.** Формирование многоголовой вращающейся детонации // Физика горения и взрыва. — 2022. — Т. 58, № 5. — С. 79–86. — DOI: 10.15372/FGV20220510. — EDN: SILCQX.

14. **Trotsyuk A. V., Fomin P. A., Vasil'ev A. A.** Numerical study of cellular detonation structures of methane mixtures // J. Loss Prev. Process Ind. — 2015. — V. 36. — P. 394–403. — DOI: 10.1016/j.jlp.2015.03.012.
15. **Matignon C., Desbordes D., Presles H. N.** Détonabilité de mélanges stoechiométriques méthane-hydrogène-oxygène-azote // C. r. Acad. sci. Ser. Mécanique. — 2006. — T. 334. — P. 238–242.
16. **Bozier O., Sorin R., Virost F., Zitoun R., Desbordes D.** Detonability of binary H₂/CH₄–air mixtures // 3rd Int. Colloquium on Hydrogen Safety, Ajaccio, France, 2009. — Paper ID 188.
17. **Rudy W., Zbikowski M., Teodorczyk A.** Detonation in hydrogen–methane–air mixtures in semi confined flat channels // Energy. — 2016. — V. 116, Pt3. — P. 1479–1483. — DOI: 10.1016/j.energy.2016.06.001.
18. **Wang L.-Q., Ma H.-H., Shen Z.-W., Chen D.-G.** Experimental study of DDT in hydrogen–methane–air mixtures in a tube filled with square orifice plates // Process Saf. Environ. Prot. — 2018. — V. 116. — P. 228–234. — DOI: 10.1016/j.psep.2018.01.017.
19. **Moen I. O., Funk J. W., Ward S. A., Rude G. M., Thibault P. A.** Detonation length scales for fuel-air explosives // Prog. Astronaut. Aeronaut. — 1984. — V. 94. — P. 55–79.
20. **Guirao C. M., Knystautas R., Lee J. H., Benedick W., Berman M.** Hydrogen-air detonations // Symp. (Int.) on Combust. — 1982. — V. 19, N 1. — P. 583–590. — DOI: 10.1016/S0082-0784(82)80232-4.
21. **Николаев Ю. А., Зак Д. В.** Согласование моделей химических реакций в газах со вторым началом термодинамики // Физика горения и взрыва. — 1988. — Т. 24, № 4. — С. 87–90.
22. **Strickland-Constable R. F.** The burning velocity of gases in relation to the ignition delay period // Symp. on Combustion and Flame, and Explosion Phenomena. — 1948. — V. 3, N 1. — P. 229–235. — DOI: 10.1016/S1062-2896(49)80031-6.
23. **Термодинамические свойства индивидуальных веществ** / под ред. В. П. Глушко. — М.: Изд-во АН СССР, 1962. — Т. 2.
24. **Cheng R. K., Oppenheim A. K.** Autoignition in methane-hydrogen mixtures // Combust. Flame. — 1984. — V. 58, N 2. — P. 125–139. — DOI: 10.1016/0010-2180(84)90088-9.
25. **Strehlow R. A., Crooker A. J., Cusey R. E.** Detonation initiation behind an accelerating shock wave // Combust. Flame. — 1967. — V. 11, N 4. — P. 339–351. — DOI: 10.1016/0010-2180(67)90023-5.
26. **Троцюк А. В., Фомин П. А.** Моделирование ячеистой структуры детонационной волны в стехиометрической двухтопливной смеси синтез-газа с окислителем // Горение и взрыв. — 2022. — Т. 15, № 1. — С. 47–56. — DOI: 10.30826/CE22150106. — EDN: QYHVPK.
27. **Солоухин Р. И.** Методы измерений и основные результаты в экспериментах на ударных трубах // 7-й Междунар. симпоз. по ударным трубам. — Новосибирск: Изд-во СО РАН СССР, 1969.
28. **The NASA Computer program CEARUN (Chemical Equilibrium with Applications).** — URL: <https://cearun.grc.nasa.gov/index.html>.
29. **Porowski R., Teodorczyk A.** Cellular structure of detonation wave in hydrogen–methane–air mixtures // J. Power Technol. — 2011. — V. 91, N 3. — P. 130–135.

Поступила в редакцию 19.04.2024.

После доработки 13.06.2024.

Принята к публикации 03.07.2024.