

УДК 534.222.2, 544.454.3

ТРЕХМЕРНОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕПРЕРЫВНОЙ СПИНОВОЙ ДЕТОНАЦИИ СМЕСИ СИНТЕЗ-ГАЗ — ВОЗДУХ В КОЛЬЦЕВОЙ КАМЕРЕ СГОРАНИЯ

Е. В. Симонов, А. И. Рыбников, А. М. Гурин,
А. В. Трилис, А. Н. Самсонов

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

В трехмерной нестационарной газодинамической постановке сформулирована замкнутая математическая модель непрерывной спиновой детонации смеси синтез-газ — воздух, разработан алгоритм численного решения задачи. Проведена верификация модели по экспериментальным данным по задержке воспламенения при высоких температурах и по результатам численных расчетов параметров детонации Чепмена — Жу-ге. Для трех стехиометрических составов в кольцевой цилиндрической камере сгорания диаметром 306 мм получены одноволновые режимы непрерывной спиновой детонации, проанализированы трехмерная структура и основные параметры течения. При варьировании удельных расходов смеси в диапазоне $90 \div 260$ кг/(с · м²) найдены минимально возможные для осуществления непрерывной детонации расходы. Проведено сравнение с существующими экспериментальными данными.

Ключевые слова: непрерывная спиновая детонация, кольцевая камера сгорания, поперечные детонационные волны, смесь синтез-газ — воздух, структура течения, математическое моделирование.

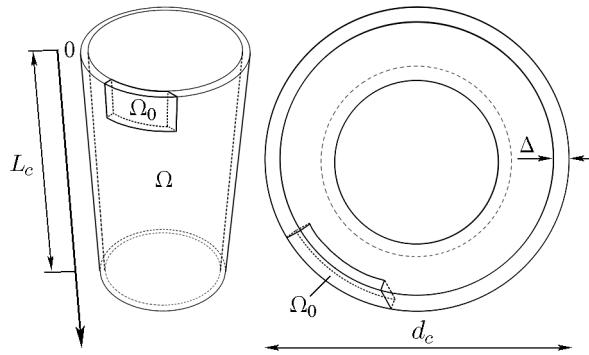
DOI 10.15372/FGV2023.9414
EDN RSLORD

ВВЕДЕНИЕ

Режим непрерывной спиновой детонации (НСД), полученный более 60 лет назад Б. В. Войцеховским [1], в настоящее время рассматривается в качестве альтернативы традиционному сжиганию топлив в турбулентном пламени. В последние десятилетия экспериментальные и численные исследования на эту тему активно ведутся как в России [2, 3], так и за рубежом [4, 5]. Для смесей водорода с окислителем первые двумерные расчеты НСД выполнены в [6], трехмерные — в [7, 8]; для углеводородных смесей — в [9].

В экспериментах [10, 11] в кольцевой цилиндрической камере сгорания (КС) диаметром 306 мм впервые реализованы режимы НСД в смесях синтез-газ — воздух различных составов, определены пределы существования, исследована структура течения в области детонационных волн. Представляет интерес провести численное моделирование указанного процесса, сравнить результаты с экспериментальными данными. Анализ литературных данных показывает, что трехмерных численных исследований НСД в смесях синтез-газ — воздух до сих пор не проводилось.

В [12] была разработана приведенная модель химической кинетики для детонационных процессов в смесях метана с воздухом, в [13, 14] модель применена для расчета детонационных ячеек в смеси синтез-газ — кислород и синтез-газ — воздух. В [15] были проведены первые двумерные численные расчеты НСД в смеси синтез-газ — воздух для КС типа применяемых в жидкостном реактивном двигателе (ЖРД), при повышенных

Рис. 1. Область численного решения задачи Ω

температурах смеси в ресивере (900 К) получены одноволновые режимы НСД. Расчеты выполнены для отличных от экспериментов [10, 11] геометрических размеров КС и параметров в системе подачи смеси.

В [16] сформулирована трехмерная газодинамическая задача и рассчитаны одноволновые режимы НСД смесей водород — кислород и водород — воздух.

Цель настоящей работы — сформулировать в трехмерной нестационарной постановке замкнутую математическую модель НСД смеси синтез-газ — воздух с использованием приведенной модели химической кинетики [12–15], верифицировать ее по известным экспериментальным и численным данным по задержке воспламенения, параметрам детонации Чепмена — Жуге, провести численное моделирование распространения поперечных детонационных волн в кольцевой цилиндрической КС и верификацию полученных результатов по экспериментальным данным [10, 11].

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим задачу математического моделирования детонационного сжигания топливно-воздушной смеси (ТВС) синтез-газ — воздух в кольцевой цилиндрической КС, представляющей собой пространство Ω между двумя соосными цилиндрами внешним диаметром d_c , длиной L_c , с кольцевым зазором между цилиндрами Δ (рис. 1).

Идеально перемешанная ТВС подается в КС через систему микросопел Лаваля, равномерно распределенных по верхнему торцу ($z = 0$). Пусть в некоторый момент времени после начала подачи ТВС в части КС Ω_0 (см. рис. 1) выделяется энергия, достаточная для инициирования детонации. В результате инициирования в КС будет распространяться нестационарная детонационная волна. Требуется определить условия ее выхода на самоподдерживающийся режим НСД, динамику, структуру и другие параметры решения в зависимости от граничных и геометрических параметров задачи. Поступающая смесь сжигается, и продукты детонации вытекают из КС в атмосферу с давлением p_a .

СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ

Неустановившееся газодинамическое течение реагирующей смеси синтез-газ — воздух в области решения Ω описывалось аналогично [16] трехмерной системой уравнений нестационарной газовой динамики с химическими превращениями:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) &= 0, \\ \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \nabla p &= 0,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}(\rho E + p)) &= 0, \\ \frac{\partial \rho I}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} I) &= \rho F_I, \\ \frac{\partial \rho \mu}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \mu) &= \rho F_\mu.\end{aligned}\quad (1)$$

Здесь t — время, ρ — плотность, $\vec{u}$ — вектор скорости, p — давление, $E = U + |\vec{u}|^2/2$, U — полная внутренняя энергия газа, μ — текущая молекулярная масса смеси, I — доля периода химической индукции; величины F_I и F_μ вычисляются в соответствии с выбранной моделью химической кинетики.

Аналогично [13–15] энерговыделение описывалось двухстадийной моделью кинетики [17] с использованием приведенной химической кинетики Фомина и др. [12]: индукционная стадия ($0 < I \leq 1$, $F_I = -1/\tau_{ind}$, $F_\mu = 0$), когда энерговыделения нет; стадия химического превращения ($I = 0$, $F_I = 0$, $F_\mu \neq 0$), когда в процессе химических реакций выделяется энергия.

В соответствии с [18] для описания задержек воспламенения двухтопливной смеси синтез-газ — воздух (первое топливо — H_2 , второе — CO) время индукции определялось по формуле

$$\tau_{ind} = \frac{A_\Sigma}{[O_2]} \exp\left(\frac{E_\Sigma}{RT}\right). \quad (2)$$

Здесь $[O_2] = \rho \nu_{O_2}/\sigma$ — концентрация кислорода, моль/л, R — универсальная газовая постоянная, T — температура, ν_{O_2} — количество молей кислорода, $\sigma = \sum \mu_i \nu_i$, μ_i — молярная масса компонента i смеси, ν_i — количество молей компонента, предэкспонент A_Σ и энергия активации E_Σ вычисляются согласно [18]:

$$A_\Sigma = A_{H_2}^{\nu_{H_2}/(\nu_{H_2} + \nu_{CO})} A_{CO}^{\nu_{CO}/(\nu_{H_2} + \nu_{CO})}, \quad E_\Sigma = (E_{H_2}\nu_{H_2} + E_{CO}\nu_{CO})/(\nu_{H_2} + \nu_{CO}), \quad (3)$$

здесь A_{H_2} , A_{CO} и E_{H_2} , E_{CO} — предэкспоненты и энергии активации из соответствующих формул вычисления периодов индукции однотопливных смесей с H_2 и CO :

$$\tau_{H_2} = \frac{A_{H_2}}{[O_2]} \exp\left(\frac{E_{H_2}}{RT}\right), \quad \tau_{CO} = \frac{A_{CO}}{[O_2]} \exp\left(\frac{E_{CO}}{RT}\right), \quad (4)$$

где используются значения $A_{H_2} = 5.38 \cdot 10^{-11}$ моль · с/л, $E_{H_2} = 71\,803.62$ Дж/моль [19], $A_{CO} = 1.38 \cdot 10^{-11}$ моль · с/л, $E_{CO} = 125\,531$ Дж/моль [13].

Дополним систему уравнений (1) уравнениями состояния

$$p = \rho RT/\mu, \quad U = U_{th} + U_{ch}, \quad (5)$$

где U_{th} , U_{ch} — термодинамическая и химическая составляющие внутренней энергии. Внутренняя энергия газа $U(T, \mu)$ отсчитывается от предельно диссоциированного состава при нулевой температуре. В зоне индукции ($I > 0$) молярная масса смеси $\mu = \mu_0 = \text{const}$, нет энерговыделения и

$$U_{th} = \frac{p}{(\gamma - 1)\rho}, \quad U_{ch} = \text{const}, \quad (6)$$

где γ — показатель адиабаты газа в зоне химической индукции.

После истечения периода индукции ($I = 0$) наступает стадия энерговыделения [13, 20], когда изменение молярной массы описывается уравнением

$$F_\mu = \frac{4K_+ \rho^2}{\mu} \left(1 - \frac{\mu}{\mu_{max}}\right)^2 - 4K_+ K_- \rho \left(\frac{\mu}{\mu_{min}} - 1\right) \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{\beta}{2}} \left(1 - \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right)\right)^\beta \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right), \quad (7)$$

а термодинамическая и химическая составляющие внутренней энергии U имеют вид

$$U_{th} = \frac{RT}{\mu} A(\mu, T), \quad U_{ch} = E_d \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{min}} \right), \quad (8)$$

$$A(\mu, T) = \frac{3}{4} \left(\frac{\mu}{\mu_a} + 1 \right) + \frac{3}{2} \left(\frac{\mu}{\mu_a} - 1 \right) \frac{\theta/T}{\exp(\theta/T) - 1},$$

где μ_{min} , μ_{max} , μ_a — молярные массы газа в предельно диссоциированном, предельно рекомбинированном и атомарном состояниях соответственно; θ — эффективная температура возбуждения колебательных степеней свободы молекул; E_d — средняя энергия диссоциации продуктов реакции.

Алгоритм вычисления констант рассматриваемой модели подробно описан в [12]. Для трех вариантов стехиометрической смеси синтез-газа с воздухом: $(1 - \alpha) \cdot 2\text{CO} + \alpha \cdot 2\text{H}_2 + \nu_{\text{O}_2} \cdot \text{O}_2 + \nu_{\text{N}_2} \cdot \text{N}_2 + \nu_{\text{Ar}} \cdot \text{Ar}$ ($\alpha = 1/2, 2/3, 3/4$), рассматриваемых в дальнейшем, значения констант следующие:

$\mu_{\text{CO}} = 28$ кг/кмоль, $\mu_{\text{H}_2} = 2$ кг/кмоль, $\mu_{\text{O}_2} = 32$ кг/кмоль, $\mu_{\text{N}_2} = 28$ кг/кмоль, $\mu_{\text{Ar}} = 40$ кг/кмоль, $\nu_{\text{CO}} = 2(1 - \alpha)$, $\nu_{\text{H}_2} = 2\alpha$, $\nu_{\text{O}_2} = 1$, $\nu_{\text{N}_2} = 3.7275$, $\nu_{\text{Ar}} = 0.0445$, $R = 8.3144 \cdot 10^3$ Дж/(кмоль $\cdot$ К), $K_+ = 6 \cdot 10^8$ с⁶/(кмоль² $\cdot$ с), $\beta = 1.5$, $\theta = 3500$ К;

$\alpha = 1/2$: $E_d = 118.257$ ккал/моль, $K_- = 47852$ кмоль/м³, $\mu_{min} = 19.169$ кг/кмоль, $\mu_{max} = 29.132$ кг/кмоль, $\mu_a = 12.456$ кг/кмоль;

$\alpha = 2/3$: $E_d = 112.878$ ккал/моль, $K_- = 12502$ кмоль/м³, $\mu_{min} = 17.515$ кг/кмоль, $\mu_{max} = 27.63$ кг/кмоль, $\mu_a = 11.814$ кг/кмоль;

$\alpha = 3/4$: $E_d = 111.96$ ккал/моль, $K_- = 8573$ кмоль/м³, $\mu_{min} = 16.733$ кг/кмоль, $\mu_{max} = 26.88$ кг/кмоль, $\mu_a = 11.493$ кг/кмоль.

Для определения константы химического равновесия K_- использовалось уравнение химической кинетики (7) с подстановкой в него рассчитанных по [21] значений параметров детонации Чепмена — Жуге для соответствующей смеси при $F_\mu = 0$.

Граничные условия задавались следующими. На входе в КС ($z = 0$) происходило втекание ТВС с исходными параметрами торможения p^* , T^* через систему микросопел Лавала с суммарной площадью сечений отверстий S^* . На выходе из КС ($z = L_c$) предполагалось истечение продуктов детонации в пространство с противодавлением p_a . Расчет граничных параметров проводился аналогично [16]. На боковых цилиндрических стенках КС ставилось условие непротекания.

В качестве начальных данных в КС задавалась неподвижная стехиометрическая ТВС одного из трех стехиометрических составов ($\alpha = 1/2, 2/3, 3/4$).

Система уравнений (1)–(8), дополненная граничными условиями и начальными данными, замкнута и полностью определяет нестационарное движение реагирующей смеси синтез-газ — воздух в рассматриваемой КС.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Рассматриваемая задача решалась численно с использованием конечно-разностной схемы Годунова [22] и программного пакета OpenFOAM, аналогично [16]. Прежде чем приступить к расчетам НСД для указанных ТВС, аналогично [23] были проведены предварительные расчеты с целью верификации рассматриваемой математической модели, приведенной химической кинетики и численного алгоритма решения задачи. Расчеты включали в себя сравнение задержек воспламенения, параметров Чепмена — Жуге одномерной детонации с известными экспериментальными или расчетными данными.

ВЕРИФИКАЦИЯ ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ЗАДЕРЖКАМ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ

В работе [24] приведены результаты измерения задержек воспламенения смесей синтез-газ — кислород — аргон различного состава, проведенных в ударной трубе, а также результаты расчетов. Один из основных выводов статьи заключается в том, что увеличение содержания СО в топливе приводит к увеличению времени индукции указанной смеси. Авторы отмечают, что разбавление H_2 с помощью СО до уровня 50 % приводит к увеличению задержки воспламенения в два раза по сравнению со смесью с 100 % H_2 в качестве топлива.

Формула для вычисления времени индукции, использованная в работе [14], хорошо подходит для описания смесей с высоким содержанием СО в топливе ($\alpha \leq 0.3$), что подтверждено авторами данной работы. Задержки воспламенения смесей с более низким содержанием СО в топливе ($\alpha = 0.5 \div 1$, $T \geq 1000$ К), рассчитанные по формуле [14], не отличаются от времени индукции смеси, содержащей 100 % H_2 в качестве топлива ($\alpha = 1$), более чем на 1 %, что противоречит выводам работы [24]. В связи с этим в настоящей работе для определения задержек воспламенения двухтопливной смеси по формуле (2) предэкспонент A_Σ и энергию активации E_Σ вычисляли по классическим формулам (3) из работы [18]. При увеличении содержания СО в топливе от 0 до 50 % время индукции рассматриваемой смеси, рассчитанное по формулам (2)–(4), растет, увеличиваясь в несколько раз.

Согласно [25] температура в пике Неймана для стехиометрических смесей $H_2/CO +$ воздух составляет $T_N \approx 1500$ К. Расчеты по алгоритму [21] для стехиометрических смесей синтез-газ — воздух показывают, что $T_N \approx 1300 \div 1500$ К, а при $\alpha \geq 0.5$ дают значение $T_N \approx 1500$ К. Следовательно, для верификации расчетной задержки воспламенения необходимо рассмотреть окрестность $T \approx 1500$ К.

В табл. 1 для смеси 2.96 % СО + 2.96 % H_2 + 2.96 % O_2 + 91.12 % Аг при $p = 4$ атм и $T = 1300 \div 1700$ К приведено время индукции, рассчитанное по соотношениям (2)–(4), в сравнении с задержками воспламенения из [24]. Как видно из табл. 1, отличие в среднем составляет полпорядка, что является удовлетворительным соответствием, учитывая, что погрешность экспериментальных измерений времени индукции может достигать полпорядка и более [26]. Таким образом, рассматриваемая модель способна достоверно описывать время индукции смесей синтез-газа с кислородом и инертным разбавителем для стехиометрических составов с $\alpha = 1/2, 2/3, 3/4$ при температурах, характерных для детонации указанных смесей.

Таблица 1

Сравнение задержек воспламенения смеси
2.96 % СО + 2.96 % H_2 + 2.96 % O_2 + 91.12 % Аг
при давлении $p = 4$ атм

T , К	τ_{ind}^1 (2)–(4), мс	τ_{ind}^2 [24], мс	Отличие, $\log(\tau^1/\tau^2)$
1 300	0.226	0.051	0.65
1 400	0.127	0.03	0.62
1 500	0.077	0.023	0.52
1 600	0.05	0.02	0.4
1 700	0.034	0.015	0.35

РАСЧЕТ ОДНОМЕРНОЙ ДЕТОНАЦИИ И ПАРАМЕТРОВ ЧЕПМЕНА — ЖУГЕ

Рассмотрена одномерная область, представляющая собой длинную узкую трубу, заполненную стехиометрической ТВС. В начальный момент времени на одном конце области была инициирована детонация путем мгновенного подвода энергии (увеличение давления и температуры), затем по области распространялась детонационная волна. Спустя $t \approx 0.02$ с волна стабилизировалась и выходила на примерно постоянные параметры.

Для горючего $\text{CO} + \text{H}_2$ расчет с использованием сетки с размером ячеек $h = 4, 2$ и 1 мм показал, что при $h \leq 2$ мм параметры в точке Чепмена — Жуге с точностью до 1% описывают точные расчетные данные по температуре, молярной массе в точке Чепмена — Жуге и скорости волны детонации из работы [21], в то время как при использовании сетки с $h = 4$ мм погрешность достигала 4% и более. В табл. 2 для трех стехиометрических смесей синтез-газ — воздух приведены данные параметров Чепмена — Жуге, вычисленные по настоящей модели при $h = 2$ мм и рассчитанные в работе [21]. Видно, что для всех трех составов смеси синтез-газ — воздух построенная модель и численный алгоритм хорошо описывают ключевые параметры детонации — скорость волны, молярную массу (с точностью до 1.5%) и температуру (с точностью до 3.2%).

ПЕРИОДИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О НСД

Решение задачи о НСД проводилось при следующих определяющих параметрах (геометрических и системы подачи ТВС):

$$d_c = 306 \text{ мм}, \quad L_c = 570 \text{ мм}, \quad \Delta = 16.5 \text{ мм};$$

$$p^* = 3.6 \text{ атм}, \quad T^* = 300 \text{ К}, \quad S^*/S_\Delta = 0.19, \quad p_a = 1 \text{ атм}, \quad \alpha = 2/3.$$

Здесь S_Δ — площадь полного поперечного сечения КС. Предварительные расчеты НСД в цилиндрической КС с последовательным уменьшением шага сетки с 4 до 1 мм показали, что при $h \approx 2$ мм погрешность расчета основных параметров решения (скорость,

Таблица 2

Параметры Чепмена — Жуге

Источник	$D_{\text{СЖ}}$, м/с	$p_{\text{СЖ}}$, атм	$T_{\text{СЖ}}$, К	$\rho_{\text{СЖ}}$, кг/м ³	$\mu_{\text{СЖ}}$, г/моль
Горючее $\text{CO} + \text{H}_2$					
Расчет	1 800	16.36	2 909	1.92	28.07
[21]	1 791.68	15.42	2 875.31	1.84	28.15
Отличие	+0.5 %	+6 %	+1.2 %	+4.3 %	−0.3 %
Горючее $\text{CO} + 2\text{H}_2$					
Расчет	1 868	16.39	2 983	1.8	26.81
[21]	1 843.07	15.45	2 891.95	1.74	26.73
Отличие	+1.4 %	+6 %	+3.1 %	+3.4 %	+0.3 %
Горючее $\text{CO} + 3\text{H}_2$					
Расчет	1 896	16.43	2 997	1.75	26.13
[21]	1 871.14	15.48	2 903.02	1.69	26.01
Отличие	+1.3 %	+6.1 %	+3.2 %	+3.6 %	+0.5 %

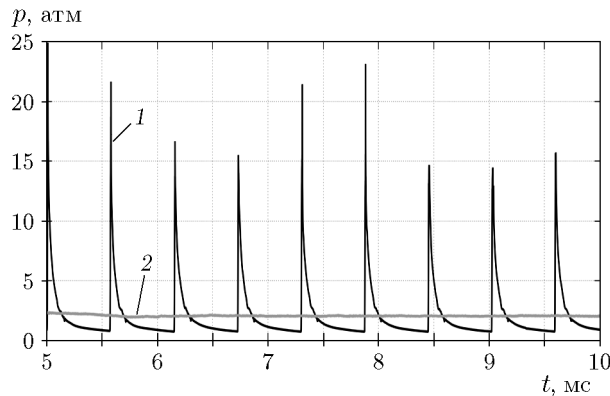


Рис. 2. Зависимость статического давления в фиксированной точке КС (1) и среднего давления (2) в середине кольцевого зазора от времени при $z = 15$ мм

высота фронта, расход и пр.) составляет не более 1 %. Данная сетка использована во всех дальнейших расчетах.

В начальный момент ($t = 0$) в части КС Ω_0 (см. рис. 1), представляющей собой часть цилиндрического сектора высотой $\approx (1/6)L_c$, путем повышения давления и температуры (на порядок по сравнению с исходным газом), мгновенно выделялась энергия, достаточная для инициирования детонации (сверхкритические параметры инициирования были установлены в ходе предварительных расчетов). По КС начинала распространяться поперечная детонационная волна (ПДВ). Для того чтобы ПДВ двигалась только в одну сторону (против часовой стрелки), в начальный момент времени область решения временно перекрывалась вертикальной твердой стенкой, которая автоматически убиралась при завершении поперечной детонационной волной первого оборота. За время $t \approx 3$ мс происходил выход на самоподдерживающийся периодический режим НСД.

На рис. 2 для синтез-газа $\text{CO} + 2\text{H}_2$ представлены зависимости текущего давления $p(t)$ в середине кольцевого зазора в фиксированной точке КС в сечении $z = 15$ мм и среднего за период статического давления $\langle p(t) \rangle$. Видно, что давление пульсирует от 0.9 до $15 \div 23$ атм с периодом $\Delta t \approx 0.58$ мс. Пиковые значения соответствуют приходу ПДВ в указанную точку. Частота вращения ПДВ $f = 1/\Delta t = 1.73$ кГц, средние скорости ПДВ, рассчитанные по периметру внешней и внутренней стенок КС, составили $D_{ex} = l_{ex}/\Delta t = \pi d_c/\Delta t \approx 1.66$ км/с и $D_{in} = l_{in}/\Delta t = \pi(d_c - 2\Delta)/\Delta t \approx 1.48$ км/с соответственно. Отношения $D_{ex}/D_{\text{СЖ}} = 0.9$, $D_{in}/D_{\text{СЖ}} = 0.8$ ($D_{\text{СЖ}} = 1.84$ км/с — скорость идеальной детонации Чепмена — Жуге [21]). Поскольку в экспериментах [10] скорость детонации измерялась относительно внешней стенки КС, далее в качестве расчетной скорости ПДВ D рассматривается скорость D_{ex} . Среднее давление $\langle p(t) \rangle$ (линия 2 на рис. 2) составило ≈ 2.14 атм.

Контроль выхода периодического решения на квазистационарный детонационный режим осуществлялся вычислением средних удельных расходов смеси на входе (g_{in}) в КС и выходе (g_{out}) из нее, среднего удельного импульса на единицу массы горючего (I_{sp}):

$$g_{in}(t) = \frac{1}{S_{in}} \iint_{S_{in}} \rho u \, dS, \quad g_{out}(t) = \frac{1}{S_{out}} \iint_{S_{out}} \rho u \, dS,$$

$$\langle p_0(t) \rangle = \frac{1}{S_{out}} \iint_{S_{out}} (p + \rho u^2) \, dS, \quad I_{sp} = (\langle p_0 \rangle - p_a) \frac{S_{\Delta}}{G_{fg}}.$$

Здесь S_{in} и S_{out} ($= S_{\Delta}$) — площади входного ($z = 0$) и выходного ($z = 570$ мм) сечений КС соответственно, $\langle p_0(t) \rangle$ — среднее полное давление на выходе из КС, G_f — расход горючего, g — ускорение свободного падения.

Спустя $t \approx 3$ мс указанные параметры выходили на примерно постоянные значения: $g_{in} \approx g_{out} \approx 130$ кг/(с · м²), $I_{sp} \approx 720$ с, $\langle p_0(t) \rangle \approx 2.3$ атм.

ТРЕХМЕРНАЯ СТРУКТУРА ПДВ

На рис. 3 представлена трехмерная структура ПДВ в смеси горючего $\text{CO} + 2\text{H}_2$ с воздухом в виде изолиний давления, температуры и молярной массы в момент времени 0.055 с. Видно, что ПДВ движется против часовой стрелки, высота фронта $H_d \approx 17$ см. Изобары (рис. 3,а) показывают резкий рост, а затем спад давления за фронтом ПДВ. На протяжении примерно 1/6 длины окружности КС втекания ТВС не наблюдается. Когда давление за ПДВ становится меньше, чем в системе подачи ТВС, продукты детонации начинают оттесняться вниз новыми порциями поступающего газа. Хорошо виден треугольник натекающей холодной смеси перед ПДВ (рис. 3,б). Вниз влево от ПДВ отходит косая ударная волна, движущаяся по горячим продуктам детонации с $T \approx 1700 \div 1800$ К, увеличивающая их температуру до $T \approx 2400 \div 2800$ К в верхней части шлейфа. К выходу из КС температура понижается до $T \approx 2100 \div 2400$ К.

Изолинии молярной массы (рис. 3,в) показывают, что перед ПДВ натекает слой ТВС с $\mu \approx 23.55$ г/моль, что соответствует стехиометрической смеси $\text{CO} + 2\text{H}_2$ с воздухом. За фронтом ПДВ молярная масса начинает меняться, достигая значений $26 \div 27$ г/моль, происходит энерговыделение. В продуктах детонации значение μ приближается к μ_{max} для данной смеси и составляет ≈ 27.4 г/моль.

Для более детального анализа трехмерной структуры течения были рассмотрены поперечные и продольные сечения КС. На рис. 4 представлена схема построения поперечных кольцевых сечений КС тремя плоскостями: $z = 10, 100, 200$ мм.

В указанных сечениях рассмотрены двумерные распределения температуры (T), доли периода индукции (I) и осевой составляющей скорости (U_z) (рис. 5). Видно, что у верхнего торца КС (рис. 5,а) за ПДВ происходит выброс продуктов детонации вверх ($U_z < 0$)

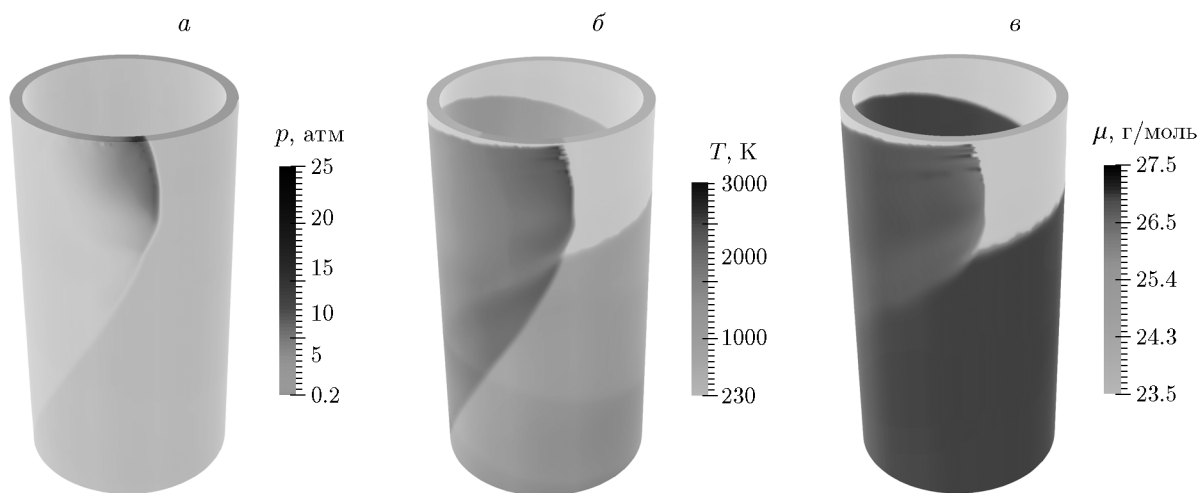


Рис. 3. Трехмерная структура ПДВ в смеси горючего $\text{CO} + 2\text{H}_2$ с воздухом при $g_{in} \approx 130$ кг/(с · м²) в момент времени 0.055 с:

а — изобары, б — изотермы, в — изолинии молярной массы

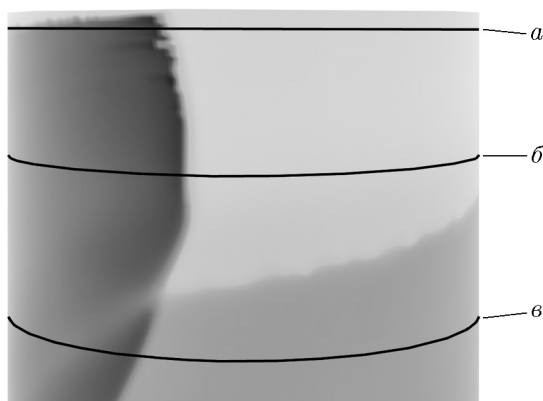


Рис. 4. Схема построения поперечных кольцевых сечений КС для анализа параметров решения в случае смеси горючего $\text{CO} + 2\text{H}_2$ с воздухом при $g_{in} \approx 130 \text{ кг}/(\text{с} \cdot \text{м}^2)$ в момент времени 0.055 с:

a — сечение $z = 10 \text{ мм}$, b — $z = 100 \text{ мм}$, v — $z = 200 \text{ мм}$

в сторону входного сечения $z = 0$. Затем совершаются неравномерные колебания с частичным оттоком продуктов обратно вниз, после чего сечение вновь запирается ($U_z < 0$), а далее наступает зона стабильных значений $U_z > 0$. Из распределений температуры T и доли периода индукции I (рис. 5, a) видно, что сначала вниз стекают продукты детонации и только потом начинается поступление исходной ТВС. Аналогично работе [16], наблюдается неравномерное натекание смеси: скорость у внешнего диаметра КС больше, чем у внутреннего. Это усложняет структуру течения и замедляет образование нового слоя, способного детонировать.

Распределение рассмотренных параметров в сечении $z = 100 \text{ мм}$ (рис. 5, b) показывает, что неравномерное натекание смеси перед ПДВ сохраняется, но происходит выравнивание скорости U_z по осевой составляющей и даже некоторое ее увеличение у внутреннего диаметра КС (по сравнению с U_z у внешнего диаметра), что приводит к относительному выравниванию всех параметров течения при $z = 200 \text{ мм}$ (рис. 5, v).

На выходе из КС (рис. 5, z) в сечении $z = 570 \text{ мм}$ показаны распределения полного давления p_0 , чисел Маха M и осевой составляющей скорости U_z . Видно, что косая ударная волна (шлейф), возникающая в продуктах детонации, достигает нижней части КС. За шлейфом полное давление увеличивается и течение становится сверхзвуковым с $M > 1$. В дальнейшем наблюдается постепенный спад полного давления и осевой составляющей скорости U_z , в результате чего числа Маха уменьшаются до дозвуковых значений.

На рис. 6 представлены схема построения продольных сечений КС (a) и распределение в них доли периода индукции I (b). Видно, что распределение вновь поступившей ТВС и продуктов в сечении КС неравномерно вплоть до сечения 4, расположенного перед ПДВ. Это означает, что энерговыделение за фронтом также будет неравномерным, что приводит к существенной трехмерности всего процесса в целом.

На рис. 7 представлены одномерные распределения давления, плотности, температуры и осевой составляющей скорости в окрестности внешней (сплошные кривые) и внутренней (штриховые) стенок КС в зависимости от азимутального угла φ в трех поперечных сечениях КС. Видно, что пики давления (рис. 7, a) и плотности (рис. 7, b) на внешней стенке КС значительно выше (до 30 %), чем на внутренней стенке. Аналогичные факты были отмечены в работе [27] для смеси H_2 — воздух, где указанные отличия составили три и более раза. Авторы связывают это с особенностями дифракции детонационных волн на

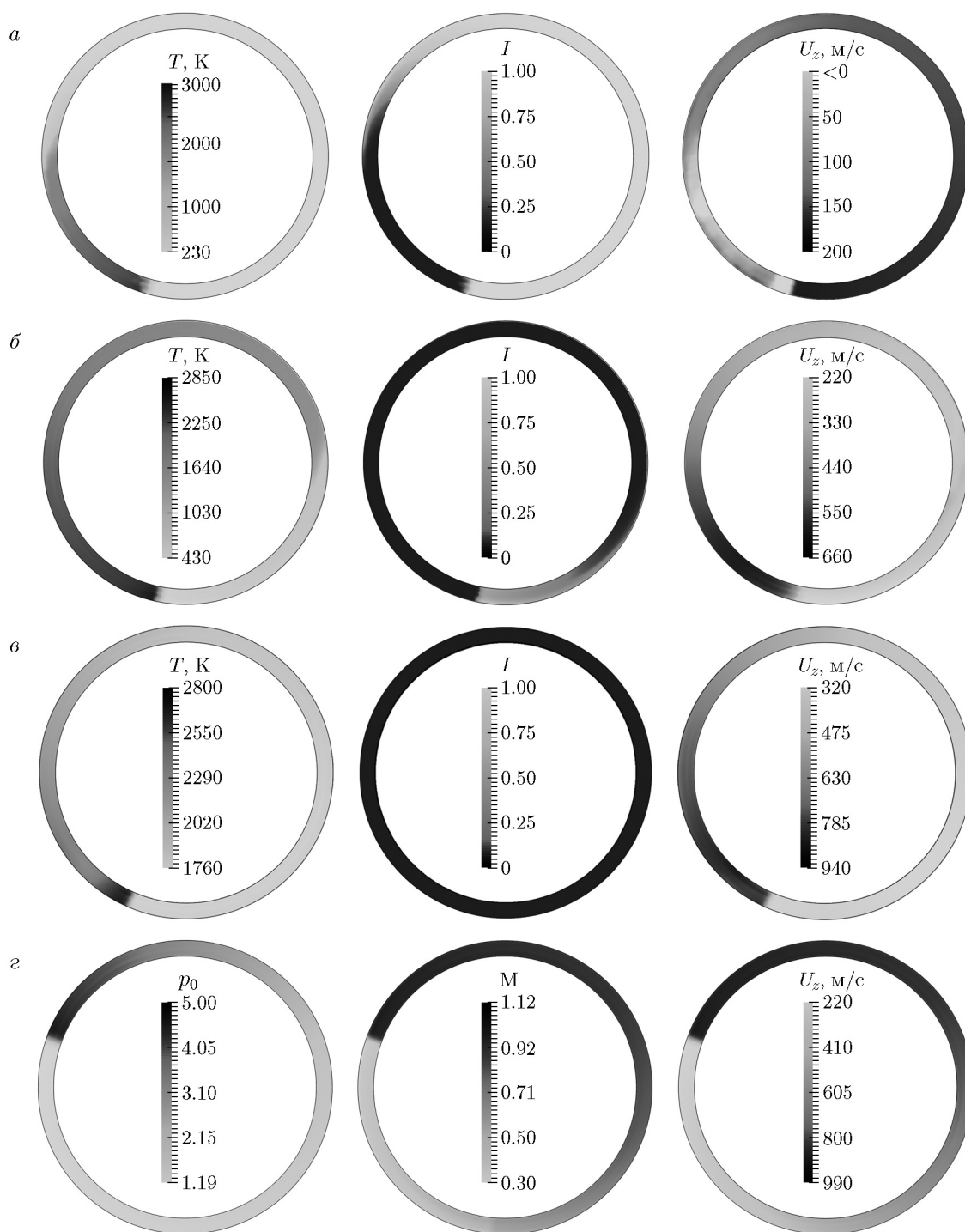


Рис. 5. Двумерные распределения температуры, доли периода индукции и осевой составляющей скорости в смеси горючего $\text{CO} + 2\text{H}_2$ с воздухом при $g_{in} \approx 130 \text{ кг}/(\text{с} \cdot \text{м}^2)$ в момент времени 0.055 с в поперечных кольцевых сечениях КС $z = 10$ (а), 100 (б), 200 мм (в), а также распределения полного давления, чисел Маха и осевой составляющей скорости на выходе из КС в сечении $z = 570$ мм (г)

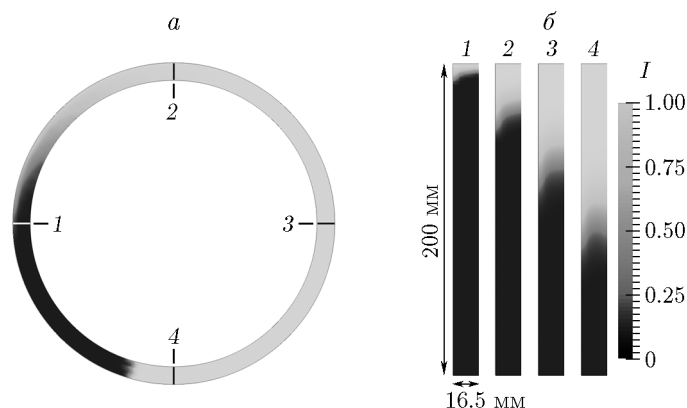


Рис. 6. Двумерные распределения доли периода индукции в смеси горючего $\text{CO} + [8\text{mm}] 2\text{H}_2$ с воздухом при $g_{in} \approx 130 \text{ кг}/(\text{с} \cdot \text{м}^2)$ в момент времени 0.055 с в продольных сечениях КС:

a — схема построения сечений 1–4, *б* — распределение значений I в рассмотренных сечениях (левый край сечений — внешняя стенка КС, правый — внутренняя)

внешней (сжимающей) и внутренней (расширяющей) стенках кольцевого цилиндрического зазора. Следует отметить, что в работе [27] ТВС в камеру сгорания подавалась не равномерно через торцевую стенку, в отличие от данной работы. Воздух поступал через узкую кольцевую щель, расположенную у внешнего диаметра КС, затем к нему подмешивался водород. Это могло быть причиной того, что параметры на внешней и внутренней стенках получились на порядок больше, чем в данной работе.

На рис. 7, *б, в* видны значительные отличия плотности и температуры на внешней и внутренней стенках в области $\pi/2 \leq \varphi \leq \pi$ в сечении $z = 10 \text{ мм}$. Это, как и наблюдавшиеся на рис. 5, 6 эффекты, показывает неравномерное натекание ТВС в области за ПДВ. Распределение осевой составляющей скорости U_z (рис. 7, *г*) в сечении $z = 10 \text{ мм}$ за фронтом ПДВ также неравномерное, с повышенными значениями на внешней стенке по сравнению с внутренней. С увеличением z параметры на внешней и внутренней стенках КС выравниваются, при $z = 200 \text{ мм}$ (кривые 5, 6) значения p , ρ , T и U_z на внешней (сплошные кривые) и внутренней (штриховые) стенках КС в целом совпадают.

Таким образом, решение рассматриваемой задачи имеет существенные трехмерные особенности, что подтверждает целесообразность и необходимость использования трехмерной модели по сравнению с двумерным приближением.

ВАРЬИРОВАНИЕ РАСХОДА ПОДАЧИ СМЕСИ

Рассмотрено влияние варьирования расхода подачи ТВС в КС на параметры решения. Для этого проведено варьирование давления торможения $p^* = 2.5 \div 7 \text{ атм}$ и, соответственно, удельного расхода смеси $g_{in} = 90 \div 260 \text{ кг}/(\text{с} \cdot \text{м}^2)$ при фиксированных значениях остальных определяющих параметров задачи. Обобщенные данные расчетов приведены в табл. 3. Видно, что с увеличением доли H_2 в смеси увеличивается скорость D и частота движения ПДВ f , удельный импульс I_{sp} , уменьшается высота фронта H_d . Среднее давление $\langle p \rangle$ в КС и удельный импульс изменяются пропорционально расходу смеси g_{in} , показывая рост при его увеличении и наоборот.

Для каждой ТВС в ходе дополнительных расчетов были получены минимальные удельные расходы (g_{min}) существования режима НСД. При меньших, чем g_{min} , расходах происходил срыв ПДВ и унос фронта горения и продуктов вниз к выходу из КС. Для

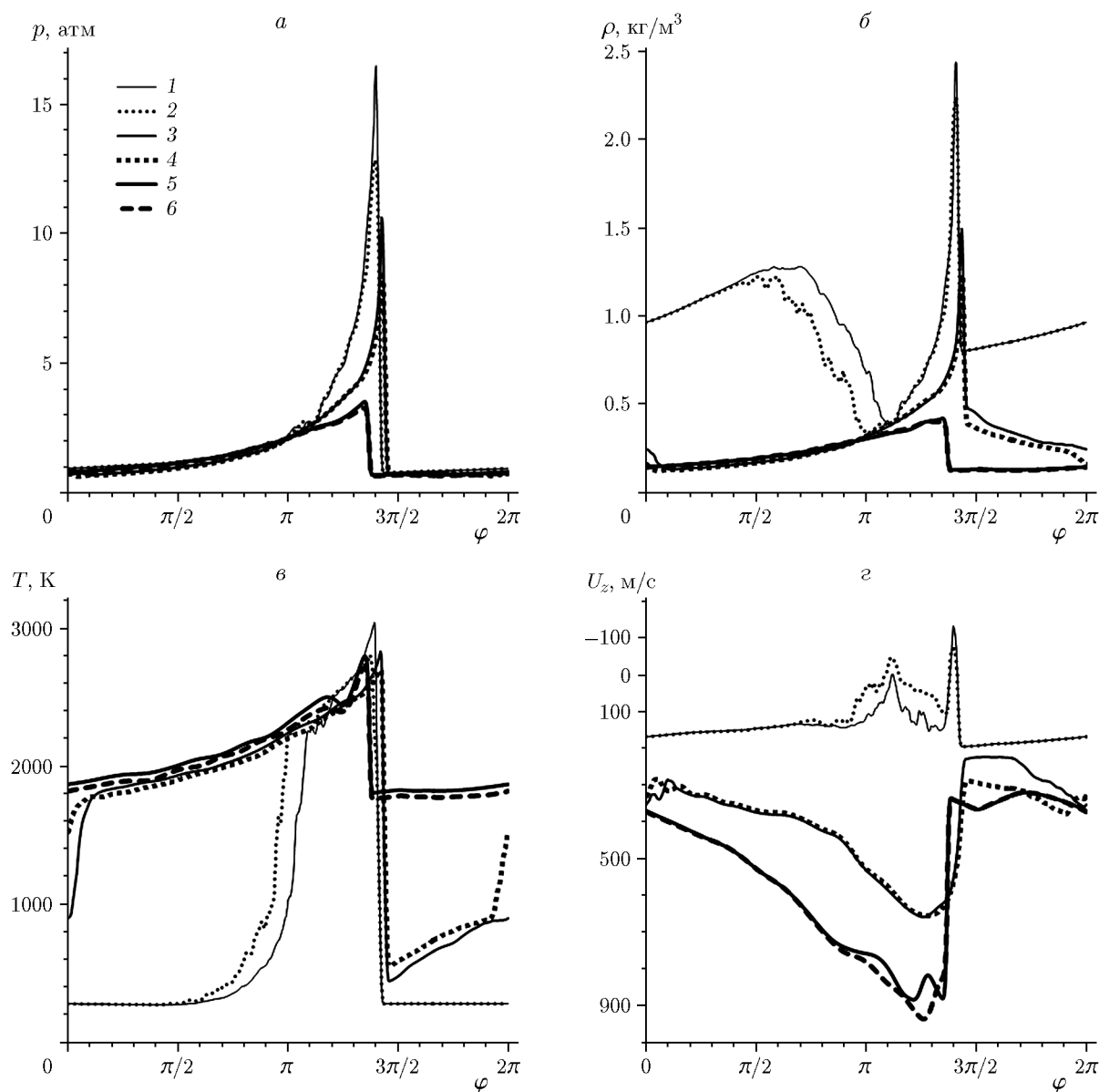


Рис. 7. «Развертка» решения трехмерной задачи в окрестности внешней (сплошные кривые) и внутренней (штриховые) стенок КС на плоскость в смеси горючего $\text{CO} + 2\text{H}_2$ с воздухом при $g_{in} \approx 130 \text{ кг}/(\text{с} \cdot \text{м}^2)$ в момент времени 0.055 с в трех поперечных сечениях КС:

1, 2 — в сечении $z = 10 \text{ мм}$, 3, 4 — $z = 100 \text{ мм}$, 5, 6 — $z = 200 \text{ мм}$; а — давление, б — плотность, в — температура, г — осевая составляющая скорости

указанных в табл. 3 ТВС значения g_{min} следующие: $\text{CO} + \text{H}_2 - g_{min} = 210 \pm 10 \text{ кг}/(\text{с} \cdot \text{м}^2)$; $\text{CO} + 2\text{H}_2 - g_{min} = 120 \pm 10 \text{ кг}/(\text{с} \cdot \text{м}^2)$; $\text{CO} + 3\text{H}_2 - g_{min} = 90 \pm 10 \text{ кг}/(\text{с} \cdot \text{м}^2)$. Поскольку для всех рассмотренных в табл. 3 случаев удельный расход ТВС находится в окрестности g_{min} , то по аналогии с методикой [3] указанные решения можно считать физически допустимыми и не относящимися к классу паразитных решений.

Таблица 3

Расчетные параметры НСД смеси синтез-газ — воздух в КС

p^* , атм	g_{in} , кг/(с · м ²)	$\langle p \rangle$, атм	H_d , см	D , км/с	f , кГц	I_{sp} , с
(CO + H ₂) — воздух						
5.87	220	3.2	18	1.63	1.7	650
6.4	240	3.55		1.65	1.72	680
6.94	260	3.7		1.67	1.74	700
(CO + 2H ₂) — воздух						
3.06	130	2.14	17	1.66	1.73	720
3.61	150	2.38		1.69	1.76	780
4.17	170	2.69		1.71	1.78	820
(CO + 3H ₂) — воздух						
2.56	100	1.71	16.5	1.68	1.75	780
2.76	120	2		1.71	1.78	830
3.31	140	2.21		1.73	1.8	910

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ И СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАМИ

В КС проточного типа с подачей воздуха через щель из коллектора область реализации НСД, по сравнению с КС типа ЖРД, заметно сужается [3]. Поэтому необходимо в первую очередь провести качественное сравнение полученных результатов с экспериментами [10, 11].

Высота фронта в эксперименте для одноволновых режимов вблизи стехиометрии изменялась в пределах $\approx 18 \div 24$ см и уменьшалась при большей доле H₂ в горючем. В расчетах получены значения $H_d \approx 16.5 \div 18$ см, что с точностью до 20 ÷ 30 % соответствует эксперименту. Качественно уменьшение H_d при переходе от топлива CO + H₂ к CO + 2H₂ и CO + 3H₂ соответствует эксперименту.

Скорость ПДВ в экспериментах около стехиометрии изменялась в пределах $\approx 1.25 \div 1.4$ км/с и увеличивалась при больших долях H₂ в смеси и больших расходах. В расчетах получено $D \approx 1.63 \div 1.73$ км/с, что с точностью около 30 % соответствует эксперименту. Данные по скорости качественно соответствуют эксперименту: при уменьшении доли H₂ или расхода смеси скорость детонации также уменьшается.

Существенное отличие (в два раза) от эксперимента получилось по минимальному удельному расходу g_{min} . В эксперименте для CO + H₂, CO + 2H₂ и CO + 3H₂ получено соответственно $g_{min} \approx 100, 60, 40$ кг/(с · м²), в то время как в расчете указанные параметры составили 210, 120 и 90 ± 10 кг/(с · м²). Отличие может быть связано с использованием упрощенной модели в данной работе, не учитывающей смешения компонентов и процессов, происходящих в режиме НСД при низких расходах смеси.

Удельный импульс I_{sp} растет пропорционально увеличению расхода смеси g_{in} , а также при увеличении доли H₂ в топливе, что качественно согласуется с экспериментами [11].

Следует отметить, что сравнение полученных данных с результатами работы [15] не представляется возможным, поскольку в этой работе рассматривалась другая смесь ($\alpha = 0.1$), другими были геометрические размеры ($d_c = 38.2$ и 63.7 см) и параметры в системе подачи ($T^* = 900$ К).

ВЫВОДЫ

На основе [16] в рамках трехмерной нестационарной постановки сформулирована замкнутая математическая модель НСД для смеси синтез-газ — воздух в кольцевой цилиндрической КС типа ЖРД с уравнением химической кинетики [12, 20]. Разработан численный алгоритм решения поставленной задачи. Проведена верификация модели и численного алгоритма. Показано, что построенная модель позволяет удовлетворительно, с точностью до полупорядка, вычислять задержки воспламенения для ТВС с синтез-газом и с точностью до $1 \div 3$ % описывать ключевые параметры Чепмена — Жуге одномерной детонации.

Впервые проведено трехмерное численное моделирование детонации при геометрических параметрах КС и удельных расходах $90 \div 260$ кг/(с·м²) для трех стехиометрических составов смесей синтез-газа с воздухом, и получены устойчивые одноволновые режимы НСД, проанализирована трехмерная структура ПДВ, проведено сравнение с экспериментами. Отличие расчета от экспериментов по скорости и высоте фронта ПДВ составило около 30 %; при увеличении удельного расхода или доли Н₂ в смеси расчет качественно согласуется с экспериментом: скорость увеличивается, высота фронта уменьшается, удельный импульс растет. Существенное отличие от эксперимента (примерно в два раза) получено по минимальному расходу существования НСД, что может быть связано с использованием упрощенной модели в данной работе, не учитывающей смешение компонентов и процессы, происходящие в режиме НСД при низких расходах смеси.

Анализ параметров в поперечных кольцевых и продольных сечениях КС, а также одномерных распределений основных параметров решения в окрестности внешней и внутренней стенок показал явную трехмерность детонационного процесса, выражающуюся в неравномерности натекания исходной ТВС из входного торца КС: как и в [16], поступающая смесь быстрее вытесняет продукты детонации у внешней стенки КС, чем у внутренней. По аналогии с работой [27], это может быть связано с особенностями дифракции детонационных волн на внешней (сжимающей) и внутренней (расширяющей) стенках кольцевого цилиндрического зазора.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Правительства Новосибирской области (проект № 19-41-543009).

ЛИТЕРАТУРА

1. Войцеховский Б. В. Стационарная детонация // Докл. АН СССР. — 1959. — Т. 129, № 6. — С. 1254–1256.
2. Bykovskii F. A., Zhdan S. A., Vedernikov E. F. Continuous spin detonations // J. Propul. Power. — 2006. — V. 22, N 6. — P. 1204–1216. — DOI: 10.2514/1.17656.
3. Быковский Ф. А., Ждан С. А. Непрерывная спиновая детонация. — Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2013.
4. Hishida M., Fujiwara T., Wolanski P. Fundamentals of rotating detonations // Shock Waves. — 2009. — V. 19, N 1. — P. 1–10. — DOI: 10.1007/s00193-008-0178-2.
5. Zhou R., Wu D., Wang J. Progress of continuously rotating detonation engines // Chin. J. Aeronaut. — 2016. — V. 29, N 1. — P. 15–29. — DOI: 10.1016/j.cja.2015.12.006.
6. Ждан С. А., Быковский Ф. А., Ведерников Е. Ф. Математическое моделирование вращающейся волны детонации в водородно-кислородной смеси // Физика горения и взрыва. — 2007. — Т. 43, № 4. — С. 90–101. — EDN: OEELVP.

7. **Yi T. H., Turangan C., Lou J.** A three-dimensional numerical study of rotational detonation in an annular chamber // 47th AIAA Aerospace Science Meeting including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition, 5–8 Jan., 2009, Orlando, Florida. — AIAA 2009-634. — DOI: 10.2514/6.2009-634.
8. **Дубровский А. В., Иванов В. С., Фролов С. М.** Трехмерное численное моделирование непрерывной детонации водородно-воздушной смеси в кольцевой камере сгорания // Горение и взрыв. — 2012. — № 5. — С. 145–150. — EDN: SIZOBD.
9. **Schwer D., Kailasanath K.** Fluid dynamics of rotating detonation engines with hydrogen and hydrocarbon fuels // Proc. Combust. Inst. — 2013. — V. 34, N 2. — P. 1991–1998. — DOI: 10.1016/j.proci.2012.05.046.
10. **Быковский Ф. А., Ждан С. А., Ведерников Е. Ф.** Непрерывная спиновая детонация смесей синтез-газ — воздух // Физика горения и взрыва. — 2013. — Т. 49, № 4. — С. 60–67. — EDN: QIXTKD.
11. **Быковский Ф. А., Ждан С. А., Ведерников Е. Ф.** Влияние геометрии камеры на реализацию непрерывной спиновой детонации смесей синтез-газ — воздух // Физика горения и взрыва. — 2015. — Т. 51, № 6. — С. 72–84. — DOI: 10.15372/FGV20150610. — EDN: VLEILJ.
12. **Fomin P. A., Trotsyuk A. V., Vasil'ev A. A.** Approximate model of chemical reaction kinetics for detonation processes in mixture of CH₄ with air // Combust. Sci. Technol. — 2014. — V. 186, N 10-11. — P. 1716–1735. — DOI: 10.1080/00102202.2014.935643.
13. **Троцюк А. В., Фомин П. А.** Моделирование нерегулярной ячеистой структуры детонационной волны в двухтопливной смеси // Физика горения и взрыва. — 2019. — Т. 55, № 4. — С. 15–20. — DOI: 10.15372/FGV20190402. — EDN: SBQALK.
14. **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.
15. **Trotsyuk A. V.** Numerical study of continuously rotating detonation in two-fuel gaseous mixture // J. Phys.: Conf. Ser. — 2021. — V. 2057. — 012066. — DOI: 10.1088/1742-6596/2057/1/012066.
16. **Rybnikov A. I., Simonov E. V., Gurin A. M., Trilis A. V., Samsonov A. N.** Three-dimensional numerical simulation of continuous spin detonation in hydrogen-oxygen and hydrogen-air mixtures using OpenFOAM package // J. Phys.: Conf. Ser. — 2019. — V. 1404. — 012065. — DOI: 10.1088/1742-6596/1404/1/012065.
17. **Левин В. А., Коробейников В. П.** Сильный взрыв в горючей смеси газов. // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. — 1969. — № 6. — С. 48–51.
18. **Васильев А. А.** Задержка воспламенения в многотопливных смесях // Физика горения и взрыва. — 2007. — Т. 43, № 3. — С. 42–46. — EDN: OCSBKJ.
19. **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.
20. **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.
21. **Прууэл Э. Р., Васильев А. А.** Уравнение состояния продуктов газовой детонации. Учет формирования конденсированной фазы углерода // Физика горения и взрыва. — 2021. — Т. 57, № 5. — С. 74–85. — DOI: 10.15372/FGV20210507. — EDN: PEDWVQ.
22. **Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П.** Численное решение многомерных задач газовой динамики / под ред. С. К. Годунова. — М.: Наука, 1976.

23. Бедарев И. А., Рылова К. В., Фёдоров 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.
24. Kéromnès A., Metcalfe W. K., Heufer K. A., Donohoe N., Das A. K., Sung C.-J., Herzler J., Naumann C., Griebel P., Mathieu O., Krejci M. C., Petersen E. L., Pitz W. J., Curran H. J. An experimental and detailed chemical kinetic modeling study of hydrogen and syngas mixture oxidation at elevated pressures // Combust. Flame. — 2013. — V. 160, N 6. — P. 995–1011. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2013.01.001.
25. Николаев Ю. А., Топчийн М. Е. Расчет равновесных течений в детонационных волнах в газах // Физика горения и взрыва. — 1977. — Т. 13, № 3. — С. 393–404. — EDN: YJLDIT.
26. Schultz E., Shepherd J. Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation // California Institute of Technology, Explosion Dynamics Lab. Rep. FM99-5. — 2000. — DOI: 10.7907/ta29-4765.
27. Дубровский А. В., Иванов В. С., Фролов С. М. Трехмерное численное моделирование рабочего процесса в непрерывно-детонационной камере сгорания с отдельной подачей водорода и воздуха // Хим. физика. — 2015. — Т. 34, № 2. — С. 65–81. — DOI: 10.7868/S0207401X1502003X. — EDN: TJFPRT.

Поступила в редакцию 26.10.2023.

После доработки 25.03.2024.

Принята к публикации 15.05.2024.
