

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПЕРЕХОДА УДАРНОЙ ВОЛНЫ В ДЕТОНАЦИЮ
В ТРУБЕ С ПРОФИЛИРОВАННЫМ
ЦЕНТРАЛЬНЫМ ТЕЛОМ

**А. В. Дубровский, С. Н. Медведев, С. М. Фролов,
И. О. Шамшин**

ИХФ РАН
г. Москва, Россия

Детонация — способ прямого сжигания вещества, который теоретически позволяет повысить коэффициент полезного действия технологических горелок и реактивных двигателей летательных аппаратов [1, 2]. Преимущество импульсно-детонационного горения — сочетание высокой топливной экономичности с высокими значениями температуры и скорости продуктов детонации. При использовании импульсной детонации в горелочных устройствах теплопередача от продуктов детонации к теплоносителю существенно выше, чем при использовании традиционных горелок за счет конвективной составляющей. В настоящее время исследуется возможность реализации процесса импульсно-детонационного горения природного газа для повышения эффективности работы энергетических установок.

Основная проблема реализации процесса импульсно-детонационного горения природного газа связана с его низкой детонационной способностью. Поэтому в качестве способа инициирования детонации рассматривают переход горения в детонацию. Для осуществления быстрого перехода горения в детонацию предложено использовать и специальные устройства ускорения пламени и фокусировки ударных волн [3]. До сих пор рассматривалась фокусировка ударных волн в соплах [3–5]. В данной работе для тех же целей предлагается использовать профилированное центральное тело (ЦТ). Работа посвящена поиску оптимальной формы ЦТ для импульсной детонационной установки с быстрым переходом горения в детонацию в ме-

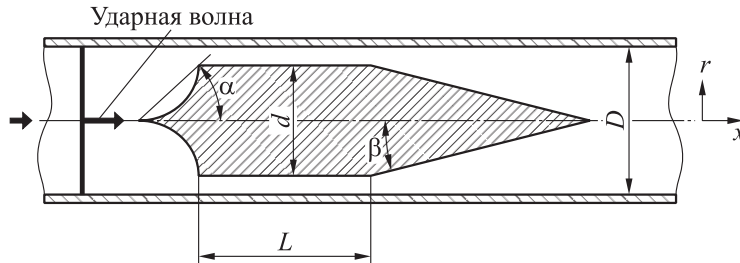


Рис. 1 Схема расчетной области

тановоздушной смеси. Поиск оптимальной формы ЦТ проводили с помощью численного моделирования дифракции относительно слабой ударной волны (число Маха $M_0 = 3,0-3,5$) на ЦТ, размещенном в прямой трубе круглого сечения.

На рис. 1 показана схема расчетной области. В трубе диаметром D расположено осесимметричное ЦТ диаметром d . Центральное тело состоит из лобовой части, имеющей параболический или конический профиль с углом атаки α , цилиндрической вставки длиной L и хвостовой части, имеющей конический или эллиптический профиль с углом схождения β . Степень перекрытия поперечного сечения трубы телом задается коэффициентом $\delta = (d/D)^2$. В начальный момент времени труба заполнена покоящейся стехиометрической метановоздушной смесью при нормальных условиях. Плоская ударная волна с требуемым числом Маха M_0 создается путем задания на левой границе расчетной области соответствующих значений давления, плотности и скорости. В результате расчета дифракции ударной волны на ЦТ определяется возможность возникновения детонации в области за ЦТ. Цель расчетов — подобрать такие параметры ЦТ (δ , L , α , β , форма профиля), при которых инициирование детонации достигается при наименьшем M_0 .

В основу математической модели положены уравнения газовой динамики для невязкого и нетеплопроводного идеального газа в цилиндрической системе координат:

$$\begin{aligned} [\rho r]_t + [\rho u r]_z + [\rho v r]_r &= 0; \\ [\rho u r]_t + [(\rho u^2 + p)r]_z + [\rho u v r]_r &= 0; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\rho vr]_t + [\rho uvr]_z + [(\rho v^2 + p)r]_r &= p; \\ [Er]_t + [(E + p)ur]_z + [(E + p)vr]_r &= r\dot{Q}; \\ [\rho Y_i r]_t + [\rho Y_i ur]_z + [\rho Y_i vr]_r &= rJ_i, \end{aligned}$$

где ρ — плотность газа; Y_i — массовые доли веществ, составляющих газовую фазу; u и v — продольная и радиальная составляющие вектора скорости; p — давление; $E = \rho(e + (u^2 + v^2)/2)$ — полная удельная энергия; $e = \int_0^T C_v(T) dT$ — внутренняя энергия газа,

$C_v(T) = \sum_{i=1}^{N_g} Y_i C_{vi}(T)$ — удельная теплоемкость газовой фазы, которую рассчитывали по известным зависимостям от температуры [5].

Систему замыкали уравнением состояния идеального газа

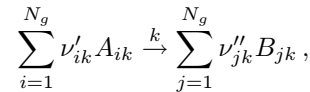
$$p = \rho RT \sum_{i=1}^{N_g} Y_i \mu_i^{-1},$$

где R — универсальная газовая постоянная; T — температура; μ_i — молекулярная масса i -го вещества.

Источники массы J_i и тепла \dot{Q} определялись по известным скоростям химических реакций w_k и энтальпиям образования веществ ΔH_i^0 :

$$J_i = \mu_i \sum_{k=1}^{N_r} (\nu''_{ik} - \nu'_{ik}) w_k; \quad \dot{Q} = \sum_{k=1}^{N_r} w_k Q_k; \quad Q_k = \sum_{i=1}^{N_g} (\nu'_{ik} - \nu''_{ik}) \Delta H_i^0.$$

Химические превращения описывали химическими реакциями вида:



где A_{ik} и B_{jk} — исходные реагенты и продукты k -й реакции; ν'_{ik} и ν''_{jk} — их стехиометрические коэффициенты, соответственно; N_g — общее число компонентов в смеси. Скорости химических реакций рассчитывали по формуле:

$$w_k = A_k \left(\frac{p}{p_0} \right)^{m_k} \exp \left(-\frac{(E_a)_k}{RT} \right) \prod_{i=1}^{N_g} \left(\frac{\rho Y_i}{\mu_i} \right)^{\nu'_{ik}},$$

Таблица 1 Кинетический механизм окисления метана

№	Реакция	Q_k , кДж/моль	E_a , кДж/моль	A_k , л, моль, с	m_k
1	$\text{CH}_4 + 3/2\text{O}_2 = \text{CO} + 2\text{H}_2\text{O}$	519	209	$4 \cdot 10^{11}$	0
2	$2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}$	484	88	$7 \cdot 10^{13}$	-0,5
3	$2\text{CO} + \text{O}_2 = 2\text{CO}_2$	566	88	$8,5 \cdot 10^{12}$	-1,5
4	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} = \text{CO}_2 + \text{H}_2$	41	174	$1 \cdot 10^{12}$	-1
5	$\text{CO}_2 + \text{H}_2 = \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	-41	208	$3,1 \cdot 10^{13}$	-1

где A_k — предэкспонентный множитель; $(E_a)_k$ — энергия активации; m_k — параметр, учитывающий изменение скорости реакции с давлением; p_0 — атмосферное давление. Кинетический механизм окисления метана, использованный в расчетах, приведен в табл. 1. Для первой реакции при вычислении скорости реакции принято $\nu'_{\text{O}_2} = 1$. Данный механизм окисления метана с приемлемой точностью воспроизводит имеющиеся экспериментальные данные по задержкам самовоспламенения в условиях, близких к исследуемым.

В основе численной реализации математической модели лежит принцип расщепления по физическим процессам, в соответствии с которым подсистема уравнений, описывающая конвективный перенос и работу сил давления, решается методом Годунова–Колгана, а подсистема обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающая химические реакции, решается явным методом Рунге–Кутты по формулам Дормана и Принса с автоматическим выбором шага интегрирования по времени. Программная реализация использует пространственную декомпозицию расчетной области на подобласти и обмен граничными данными при помощи MPI (Message Passing Interface, интерфейс передачи сообщений) для ускорения вычислений на многопроцессорных компьютерах.

Расчеты проведены для трубы диаметром $D = 97$ мм. Длина расчетной области — 1 м. Разностная сетка — равномерная с шагом 0,2 мм. Расчеты и опыты с профилированными соплами [3–5] показали, что инициирование детонации легче всего происходит при $\delta = 0,7$. Принимая во внимание этот факт, расчеты с ЦТ были также проведены для степени перекрытия сечения 0,6–0,7. В ходе предварительных расчетов ($L = 1$ м, $\beta = 90^\circ$) было установлено,

что оптимальным для инициирования детонации является ЦТ с параболическим профилем лобовой части и $\alpha = 40^\circ\text{--}45^\circ$. При этом оказалось, что при прочих равных условиях детонация в трубе с ЦТ инициировалась легче, если для конического профиля хвостовой части тела значение $\delta = 0,6$, а для параболического — $\delta = 0,7$ (в обоих случаях значения β изменялись от 3° до 7°). Число Маха инициирующей ударной волны изменяли в диапазоне от 3,2 до 3,8. В расчетах инициирование детонации получено при $M_0 \approx 3,5$ и $\delta = 0,6$ для ЦТ конического ($\alpha = 45^\circ$) и параболического ($\alpha = 40^\circ$) профилей головной части с хвостовыми частями конического, параболического и эллиптического профилей ($\beta \leq 7^\circ$). Как правило, инициирование детонации происходило через стадию перешагнутой детонации, т. е. скорости лидирующего фронта были больше термодинамической скорости детонации ($D/D_{СД} = 1,2\text{--}1,4$). При этом на фронте детонационной волны всегда наблюдались «горячие точки», образованные столкновением поперечных волн. На рис. 2 показана типичная картина инициирования детонации на примере расчета дифракции ударной волны с $M_0 = 3,5$ на ЦТ с параболическим профилем головной и хвостовой части ($\alpha = 40^\circ$, $\beta = 7^\circ$, $L = 60$ мм, $\delta = 0,6$).

Таким образом, в результате численного моделирования распространения ударной волны в трубе с ЦТ доказана возможность сокращения расстояния и времени для перехода горения в детонацию в метановоздушной смеси. Профиль ЦТ должен удовлетворять определенным требованиям: перекрывать сечение трубы с $\delta = 0,6$, иметь параболический профиль головной части с $\alpha = 40^\circ$ и параболический или эллиптический профиль хвостовой части с $\beta \leq 7^\circ$.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (государственные контракты № 02.516.12.6026 «Разработка процесса импульсного детонационного горения природного газа для повышения эффективности работы энергетических установок» и № П502 «Разработка методов численного моделирования нестационарного горения и детонации газов и капельных смесей в каналах сложной геометрии и полуограниченных объемах для применения в импульсно-детонационных энергетических установках»), а также при частичной поддержке РФФИ (проект 08-08-00068) и Президиума Российской академии наук (программа № 22).

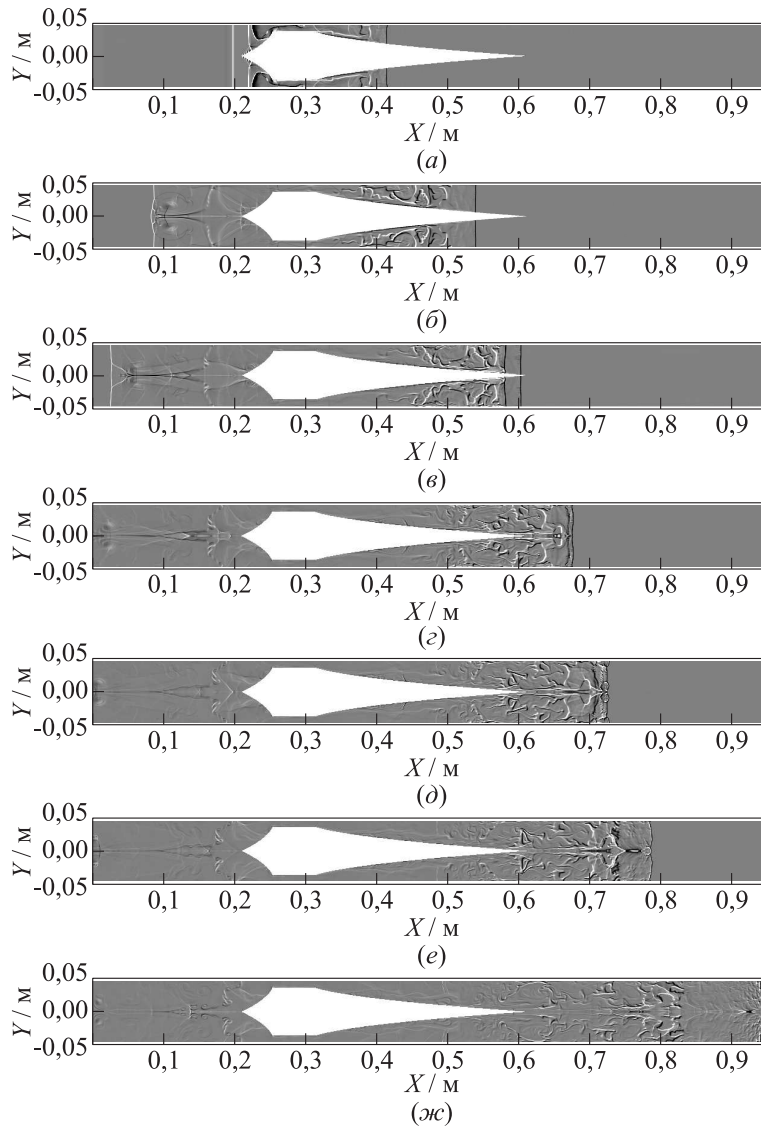


Рис. 2 Полутоновые профили градиента плотности в различные моменты времени: (а) 0,200 мс; (б) 0,300; (в) 0,350; (г) 0,400; (д) 0,425; (е) 0,450; (ж) 0,520 мс

Литература

1. Зельдович Я. Б. К вопросу об энергетическом использовании детонационного горения // ЖТФ, 1940. Т. 10. Вып. 17. С. 1453–1461.
2. Фролов С. М., Барыкин А. Е., Борисов А. А. Термодинамический цикл с детонационным сжиганием топлива // Хим. физика, 2004. Т. 23. № 3. С. 17–25.
3. Фролов С. М. Быстрый переход горения в детонацию // Хим. физика, 2008. Т. 27, № 6. С. 31–44.
4. Фролов С. М., Аксенов В. С. Иницирование газовой детонации в трубе с профилированным пересжатием сечения // Горение и взрыв. Вып. 2 / Под ред. С. М. Фролова. — М.: ТОРУС ПРЕСС, 2009. С. 26–30.
5. Semenov, I. V., P. S. Utkin, V. V. Markov, S. M. Frolov, and V. S. Ak-senov. 2010. Numerical and experimental investigation of detonation initiation in profiled tubes. *Sci. Technol.* 182:1735–46.
6. JANAF: Thermochemical tables. 1970. 2nd ed. U.S. Dept. of Commerce, National Bureau of Standards. Washington, D.C.