

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
УЧРЕЖДЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК  
ИНСТИТУТ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ им. Н.Н. Семенова РАН

---

На правах рукописи

УДК 534.222.2

ИВАНОВ Владислав Сергеевич

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ПЕРЕХОДА ГОРЕНИЯ В ДЕТОНАЦИЮ  
ВО ВЗРЫВЧАТЫХ ГАЗОВЫХ СМЕСЯХ**

01.04.17 – Химическая физика,  
горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

МОСКВА-2011

Работа выполнена в Учреждении Российской академии наук Институте химической физики им. Н.Н. Семенова РАН

Научный руководитель: доктор физико-математических наук  
Фролов С.М. (ИХФ РАН)

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук  
Марков В.В. (МИ РАН)

доктор физико-математических наук  
Слуцкий В.Г. (ИХФ РАН)

Ведущая организация: Федеральное государственное унитарное  
предприятие «Центральный институт  
авиационного моторостроения  
им. П.И. Баранова»

Защита состоится «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2011 г. в \_\_\_\_\_ часов на заседании  
Специализированного совета Д.002.012.02 при Учреждении Российской  
академии наук Институте химической физики им. Н.Н. Семенова РАН по  
адресу: 119991, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИХФ РАН и на Интернет-  
сайте института [www.chph.ras.ru](http://www.chph.ras.ru).

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2011 г.

Учёный секретарь Диссертационного совета  
кандидат физико-математических наук

Голубков М.Г.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Диссертация направлена на решение фундаментальной проблемы теории горения и взрыва – количественного описания и прогнозирования перехода горения в детонацию (ПГД) во взрывчатых смесях газообразных горючих с воздухом. Несмотря на длительные экспериментальные и теоретические исследования ПГД количественная прогностическая теория этого физико-химического явления в настоящее время отсутствует. Такое положение дел объясняется чрезвычайной сложностью явления, в результате которого скорость распространения фронта химической реакции увеличивается на 3–4 порядка (от нескольких десятков см/с до 1800–2000 м/с) в течение очень короткого промежутка времени (до 10–15 мс). Решение указанной фундаментальной проблемы неразрывно связано с совершенствованием техники безопасности на взрывоопасных производствах, а также с переходом к практическому использованию детонации в энергетике и на транспорте – в технологических горелках и в новых системах реактивного движения. Этим обусловлена актуальность темы диссертационной работы.

**Цель работы.** Цель работы – создание эффективного алгоритма и вычислительной программы для многомерного численного моделирования ПГД в каналах сложной геометрии с одновременным пространственным и временным разрешением фронтальных и объемных химических реакций в сжимаемом турбулентном газовом потоке.

**Научная новизна.** В работе получены следующие новые научные результаты:

- (1) разработана новая модель горения с явным выделением фронта пламени (ЯВП), сопряженная с методом частиц (МЧ), учитывающая одновременное протекание фронтальных и объемных химических реакций;
- (2) новая ЯВП–МЧ-модель проверена на экспериментальных данных по распространению пламени в воздушных смесях водорода, метана и пропана в полукрытых гладких трубах и трубах с регулярными препятствиями, а также в закрытых сосудах;
- (3) впервые с помощью численного моделирования показано, что предпламенное самовоспламенение газа при горении в закрытом сосуде имеет ярко

выраженный очаговый характер, причем видимая скорость распространения объемной реакции в предпламенной зоне определяется предысторией процесса горения, непостоянна по времени и неизотропна по пространству;

(4) с помощью новой модели впервые проведен многомерный расчет ПГД в стехиометрической пропано-воздушной смеси в канале с ускорителем пламени в виде регулярных препятствий и фокусирующим элементом в виде сопла и показано, что удельный импульс силы, действующей на закрытый конец канала, составляет ~2500 с;

(5) с помощью новой ЯВП–МЧ-модели впервые проведены многомерные расчеты нестационарного газодинамического течения в воздушно-реактивном импульсном детонационном двигателе (ИДД), работающем в циклическом режиме на газообразном пропане, и его обтекания в условиях сверхзвукового полета с числом Маха 3.0 на высоте 9.3 и 16 км;

(6) впервые показано, что в воздушно-реактивном ИДД с длиной и диаметром тракта 2.12 м и 83 мм возможен циклический рабочий процесс с частотой 48 Гц с быстрым ПГД на расстоянии всего 5–6 калибров камеры сгорания;

(7) впервые показано, что удельный импульс воздушно-реактивного ИДД в условиях сверхзвукового полета с числом Маха 3.0 приблизительно составляет 1700 с, что существенно выше удельного импульса, характерного для прямоточного воздушно-реактивного двигателя (ПВРД) на обычном горении в тех же условиях полета (1200–1500 с).

**Практическая значимость.** Разработанный алгоритм и вычислительная программа, адаптированная для массивно-параллельных расчетов ПГД и детонации, станут инструментом для проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ, направленных на создание взрывобезопасных технологий и взрывозащищенных сооружений, экологически чистых камер сгорания, а также устройств новой техники – импульсных детонационных газодинамических устройств (реактивных тяговых модулей, горелок, испарителей, размельчителей и др.).

**Основные результаты, представляемые к защите.** На защиту выносятся следующие результаты:

- (1) Новая ЯВП–МЧ-модель, учитывающая одновременное протекание фронтальных (во фронте пламени) и объемных (в предпламенной зоне и в продуктах горения) химических реакций;
- (2) Результаты сравнения расчетов по ЯВП–МЧ-модели с экспериментальными данными по распространению пламени в гладких трубах, трубах с регулярными препятствиями и в закрытых сосудах;
- (3) Результаты трехмерных расчетов турбулентного горения пропано-воздушных смесей с образованием «быстрого» и «термического» оксида азота, а также двумерных расчетов предпламенного самовоспламенения водородо-воздушной смесей в закрытых сосудах разной геометрии;
- (4) Результаты двумерного расчета ПГД в стехиометрической пропано-воздушной смеси в канале с ускорителем пламени в виде регулярных препятствий и фокусирующим элементом в виде сопла и оценки удельного импульса силы, действующей на закрытый конец канала;
- (5) Результаты двумерных расчетов нестационарного осесимметричного газодинамического течения в воздушно-реактивном ИДД, работающем в циклическом режиме на газообразном пропане, и его обтекания в условиях сверхзвукового полета с числом Маха 3.0 на высоте 9.3 и 16 км;
- (6) Результаты расчетов характеристик (суммарной силы, силы тяги, силы аэродинамического сопротивления, расхода горючего, удельного импульса) воздушно-реактивного ИДД в условиях сверхзвукового полета с числом Маха 3.0 на высоте 9.3 и 16 км.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертационной работы докладывались на научных сессиях МИФИ (2008, 2009 и 2010, г. Москва); семинарах и научных конференциях отдела горения и взрыва ИХФ РАН (2009, 2010, г. Москва); на III и IV Международных симпозиумах по неравновесным процессам, горению и атмосферным явлениям (2007 и 2009, г. Сочи); на XXXIII и XXXIV Академических чтениях по космонавтике (2009 и 2010, г. Москва); на VI и VII Международных коллоквиумах по импульсной и непрерывной детонации (2008, г. Москва; 2010, г. Санкт-Петербург); на VII и VIII Международных симпозиумах по опасности, подавлению и

предотвращению промышленных взрывов (2008, г. Санкт-Петербург; 2010, г. Йокогама, Япония); на XIV Симпозиуме по горению и взрыву (2008, г. Черногоровка); на II конференции «Атмосфера, ионосфера, безопасность» (2010, г. Калининград); и на XXIII Международной конференции «Уравнения состояния вещества» (2008, п. Эльбрус).

**Публикации.** Основные результаты диссертации опубликованы в 23 работах, включая 11 статей и 12 тезисов докладов на тематических конференциях.

**Личный вклад автора.** Соискатель принимал непосредственное участие в постановке задач, разработке вычислительных программ, проведении расчетов, их обработке и анализе, а также подготовке статей и докладов на конференциях.

**Структура работы.** Работа состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 145 страницах, включая 12 таблиц и 79 иллюстраций.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Введение.** Во введении обоснована актуальность темы диссертации и практическая значимость проведенных исследований, сформулирована цель работы и пути ее достижения. Коротко описаны основные научные результаты и их научная новизна. Приведены основные положения, выносимые на защиту.

**Глава 1. Обзор литературы.** В Главе 1 представлен критический обзор литературы по моделям турбулентности и моделям горения, а также по расчетам газодинамического течения в моделях воздушно-реактивных ИДД и их тяговых характеристик.

**Глава 2. Математическая модель химически реагирующего течения.** В Главе 2 приведено описание математической модели турбулентного реагирующего течения и новой ЯВП–МЧ-модели горения, учитывающей одновременное протекание фронтальных и объемных химических реакций, а также реакций образования вредных веществ в продуктах горения.

Течение вязкого сжимаемого газа описывали осредненными по Рейнольдсу двумерными нестационарными уравнениями Навье–Стокса, энергии и неразрывности химических компонентов смеси. Турбулентные потоки вещества, количества движения и энергии, входящие в определяющие уравнения, модели-

ровали с помощью стандартной  $k - \varepsilon$ - модели турбулентности. Систему уравнений замыкали калорическим и термическим уравнениями состояния идеального газа с переменной теплоемкостью, а также начальными и граничными условиями. Все теплофизические параметры газа считались переменными.

При моделировании химических источников в уравнениях для массовой доли  $l$ -го компонента смеси  $\dot{r}_l$  и сохранения энергии  $\dot{Q}$  при турбулентном горении учитывали вклад как фронтального горения (индекс  $f$ ), так и объемных предпламенных реакций (индекс  $V$ ):

$$\dot{r}_l = \dot{r}_{lf} + \dot{r}_{lV}, \quad \dot{Q} = \dot{Q}_f + \dot{Q}_V.$$

Для определения  $\dot{r}_{lf}$  и  $\dot{Q}_f$  использовали алгоритм ЯВП. Вклады объемных реакций,  $\dot{r}_{lV}$  и  $\dot{Q}_V$ , определяли с помощью МЧ.

Алгоритм ЯВП основан на модели кусочно-турбулентного пламени и принципе суперпозиции Гюйгенса. Фронт пламени представляется набором бесконечно тонких элементарных площадок (элементов), отделяющих свежую смесь от продуктов горения. В турбулентном потоке каждый  $i$ -й элемент фронта пламени движется с локальной мгновенной скоростью  $\vec{u}_{fi}$ , равной сумме нормальной скорости турбулентного горения  $\vec{u}_{Ti} = \vec{u}_n S / S_{mi}$  и скорости течения  $\vec{u}_i$ :  $\vec{u}_{fi} = \vec{u}_{Ti} + \vec{u}_i$ . Здесь  $u_n$  – нормальная скорость ламинарного пламени,  $S$  – площадь поверхности искривленного фронта пламени,  $S_{mi}$  – площадь поверхности  $i$ -го элемента пламени, а длина вектора скорости  $\vec{u}_i$  определяется как  $u_i = U_i + U'_i$  ( $U_i$  – средняя скорость).

Локальную скорость турбулентного горения  $u_T$  можно определить по одной из известных моделей турбулентного пламени. Например, в модели Щелкина  $u_T \approx u_n \sqrt{1 + U'^2 / u_n^2}$ , т.е.  $u_T$  зависит от локальной скорости  $u_n$  и локальной пульсационной скорости  $U'$ . В алгоритме ЯВП скорость ламинарного пламени  $u_n$  берется из подробных электронных таблиц как функция начальных значений температуры, давления и концентраций компонентов в смеси. Такие таблицы составляются на основе решения задачи о структуре

плоского ламинарного пламени с использованием либо детальных, либо полуэмпирических кинетических механизмов и содержат информацию о концентрационных пределах распространения пламени. Что касается составляющих локальной скорости течения  $U$  и  $U'$ , то они определяются из решения системы осредненных уравнений течения по специальной процедуре интерполяции.

Таким образом, алгоритм ЯВП позволяет в каждый момент времени для любого выбранного контрольного объема (вычислительной ячейки) определить площади поверхности всех элементов пламени  $S_{mi}$  и соответствующие им значения нормальной скорости турбулентного горения  $u_{Ti}$  и, следовательно, рассчитать вклад фронтального горения  $\dot{r}_f$  и  $\dot{Q}_f$  в химические источники  $\dot{r}_i$  и  $\dot{Q}$ :

$$\dot{r}_{lf} = Y_l V^{-1} \sum S_{mi} u_{Ti}, \quad \dot{Q}_f = Q \dot{r}_{lf},$$

где  $Y_l$  – средняя массовая доля  $l$ -го компонента в предпламенной зоне,  $V$  – объем вычислительной ячейки,  $Q$  – тепловой эффект реакций горения в пламени, а суммирование производится по всем элементам фронта пламени в ячейке.

Одно из преимуществ алгоритма ЯВП – возможность его использования как для расчета начальной стадии распространения фронта пламени (когда пламя ламинарное), так и для последующего ускорения пламени, когда пламя искривляется турбулентными пульсациями. Действительно, отличие между используемыми моделями турбулентного и ламинарного горения гомогенных смесей газов заключается только в использовании скорости  $u_T$  вместо  $u_n$ . Кроме того, известные формулы для вычисления  $u_T$ , как правило, дают асимптотический переход от турбулентного к ламинарному режиму распространения фронта пламени в отсутствие турбулентности (когда  $U' \rightarrow 0$ ,  $u_T \rightarrow u_n$ ).

В алгоритме МЧ, используемом для определения вкладов объемных предпламенных реакций  $\dot{r}_V$  и  $\dot{Q}_V$  в химические источники, мгновенные локальные состояния турбулентного реагирующего течения представляются в виде набора взаимодействующих (лагранжевых) частиц. Каждая  $i$ -я частица обладает индивидуальными свойствами: положением в пространстве  $x_k^i$  и



тремя локальным мгновенными компонентами скорости  $u_k^i$  ( $k = 1, 2, 3$ ), объемом  $V^i$ , плотностью  $\rho^i$ , статической энтальпией  $h^i$ , массовыми долями химических компонентов  $y_l^i$  ( $l = 1, \dots, N$ ) и статистическим весом  $w^i$ , используемым при определении средних значений переменных по ансамблю частиц. Для каждой  $i$ -й частицы решается система уравнений движения, непрерывности химических компонентов и энергии. Для определения потоковых (обменных) членов, описывающих молекулярную диффузию и теплопроводность, а также вязкое трение, в МЧ используются классические модели линейной релаксации к среднему. Средние значения концентрации, скорости и энтальпии определяются либо интерполяцией соответствующих средних значений, полученных из решения осредненных уравнений течения, либо осреднением по ансамблю частиц. Поле среднего давления  $P(t, x_k)$  и локальная частота турбулентных пульсаций, требуемые для решения системы уравнений МЧ, определяются из решения осредненных уравнений течения и уравнений  $k - \varepsilon$ -модели турбулентности.

Важнейшее преимущество МЧ – возможность точного определения скоростей химических реакций в турбулентном потоке: вклад объемных реакций  $\dot{r}_V$  и  $\dot{Q}_V$  в химические источники  $\dot{r}_l$  и  $\dot{Q}$  определяется формулами:

$$\dot{r}_V = \frac{\sum_i w^i J_l^i}{\sum_i \rho^i V^i}, \quad \dot{Q}_V = \sum_i w^i \dot{Q}_V^i,$$

где  $J_l^i$  и  $\dot{Q}_V^i$  - изменение массовой концентрации  $l$ -го вещества и скорость энерговыделения за счет химических реакций в  $i$ -й частице соответственно.

Для численного решения задачи сопряженную модель ЯВП–МЧ с электронными таблицами скорости ламинарного пламени и кинетическим механизмом предпламенного окисления горючего (водород, метан, пропан) в частицах внедрили в газодинамический пакет. Задачу решали численно методом контрольных объемов, используя последовательные приближения с коррекцией давления (SIMPLE-метод). Влияние твердых поверхностей на характеристики течения учитывали с помощью пристеночных функций.

### **Глава 3. Расчет ускорения фронта пламени и перехода горения в**

**детонацию.** В Главе 3 разработанную модель химически реагирующего течения применили для расчета ускорения фронта пламени в гладких трубах и трубах с регулярными препятствиями, а также для моделирования ПГД.

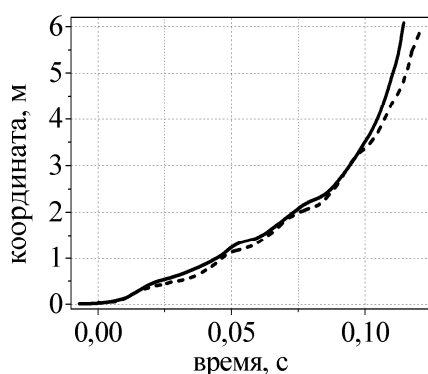
В первой серии расчетов рассмотрели динамику ускорения стехиометрического пропано-воздушного пламени в прямых гладких трубах квадратного сечения  $40 \times 40 \text{ мм}^2$  разной длины (2.6, 3.6, 5.1 и 6.1 м) с одним открытым и одним закрытым концом и сравнили результаты расчетов с экспериментальными данными Б. Вейсьера (Франция). Использовали плоскую однородную структурированную сетку с размером ячеек 2 мм. В каждой расчетной ячейке фронт пламени описывали не менее чем 15 элементами. Начальный очаг пламени представляли в виде круга радиусом 1 мм, расположенного на расстоянии 1 см от закрытого конца трубы на плоскости симметрии.

На рис. 1 проведено сравнение расчетных (сплошные кривые) и экспериментальных (штриховые кривые) зависимостей пройденного пламенем расстояния от времени. Как и в экспериментах, в качестве характерной точки на фронте пламени выбирали лидирующую точку. Несмотря на то, что двумерный расчет распространения фронта пламени по каналу квадратного сечения не может претендовать на точное отражение реальной трехмерной структуры течения, видно удовлетворительное согласие расчетов с экспериментальными данными. Важно то, что расчет дает правильное качественное и удовлетворительное количественное описание движения фронта пламени от закрытого конца трубы к открытому и учитывает взаимодействие пламени с возникающими волнами разрежения и сжатия.

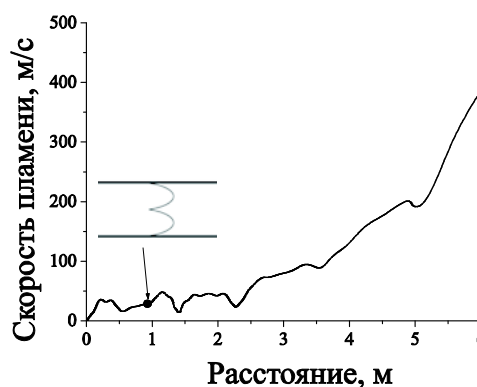
Дифференцирование расчетной кривой, представленной на рис. 1, дает зависимость видимой скорости фронта пламени от времени. Например, на рис. 2 показана расчетная зависимость видимой скорости пламени от пройденного расстояния для трубы длиной 6.1 м. Видно, что ближе к открытому концу трубы видимая скорость пламени достигает 400 м/с. Ускорение фронта пламени немонотонно. Локальные максимумы и минимумы на рис. 2 соответствуют взаимодействиям фронта пламени с волнами сжатия и разрежения. Эти волны

возникают вследствие отражений от закрытого и открытого концов трубы волн давления, формирующихся при ускорении фронта пламени.

Взаимодействие пламени с волнами сжатия и разрежения влияет не только на его движение, но и на изменение его осредненной формы. В расчетах наблюдались разные формы пламени, включая тюльпанообразную форму (см. вставку на рис. 2), которая регистрировалась в экспериментах. Такая форма пламени возникает после первого взаимодействия с волной сжатия, отраженной от открытого конца трубы, когда видимая скорость пламени достаточно мала.



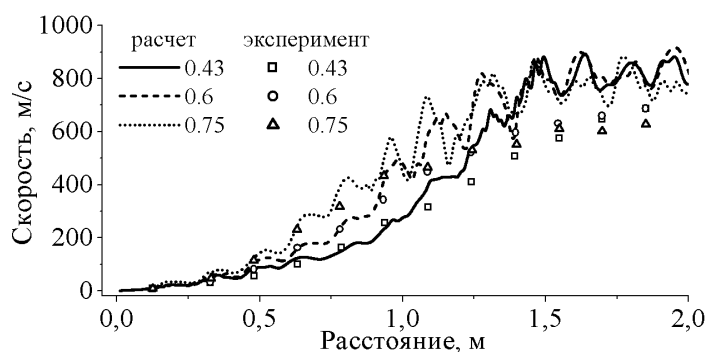
**Рис. 1** Сравнение расчетной (сплошная кривая) и экспериментальной (штриховая кривая) зависимостей расстояния, пройденного пламенем в трубе длиной 6.1 м, от времени.



**Рис. 2** Расчетная зависимость видимой скорости фронта пламени от пройденного расстояния.

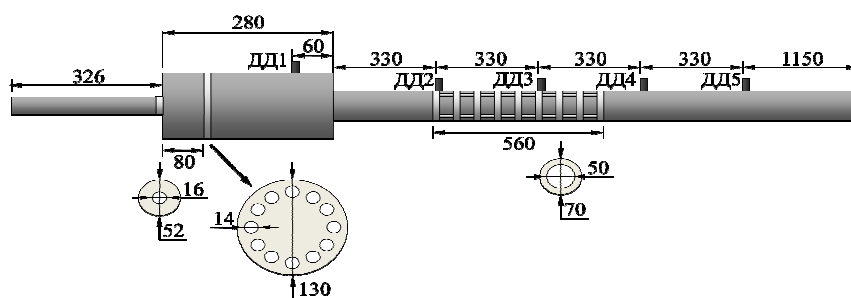
Во второй серии расчетов рассмотрели динамику ускорения стехиометрического пропано-воздушного пламени в прямой цилиндрической трубе круглого сечения диаметром 152 мм и длиной 3.1 м с регулярными кольцевыми препятствиями. Один конец трубы был открыт в атмосферу, а другой закрыт. Расчеты проводили для условий, в которых выполнялись эксперименты Г. Цикарелли (США). Кольцевые препятствия имели степень затенения сечения 0.43, 0.6 и 0.75 и устанавливались с шагом, равным диаметру трубы. Степень затенения определяли как отношение площади препятствий к площади поперечного сечения трубы. Результаты расчетов сравнивали с экспериментальными данными. В расчетах использовали двумерную осесимметричную расчетную сетку с теми же настройками, что и в первой серии.

На рис. 3 приведено сравнение экспериментальных и расчетных зависимостей скорости фронта пламени от пройденного расстояния для трех значений степени затенения сечения препятствиями. Видно, что результаты расчетов удовлетворительно согласуются с экспериментальными наблюдениями. Очень хорошее согласие наблюдается на начальном участке ускорения пламени до 300–400 м/с. Пламя ускоряется до скорости 800–900 м/с, что соответствует адиабатической скорости звука в продуктах горения (около 890 м/с). На начальной стадии, ускорение пламени более эффективно в трубе с большими препятствиями.

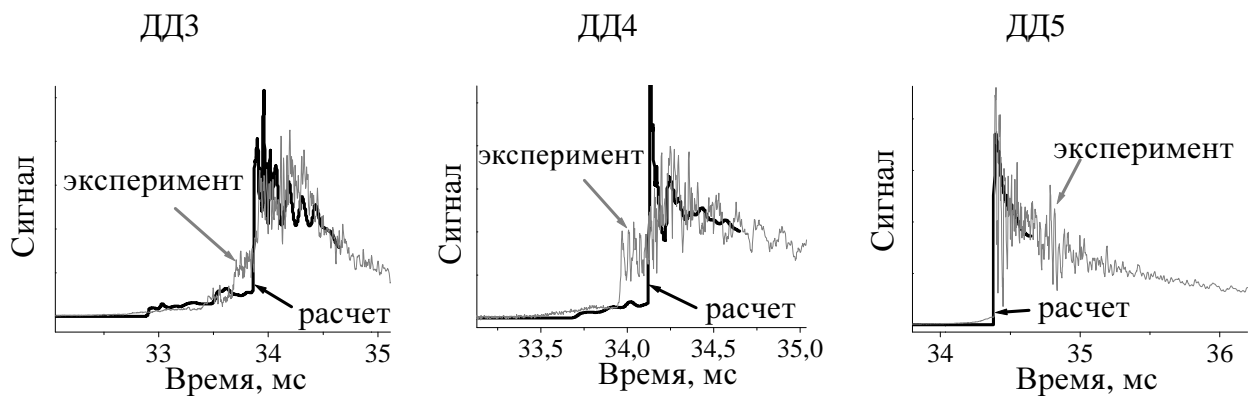


**Рис. 3** Сравнение расчетных (кривые) и экспериментальных (точки) зависимостей видимой скорости фронта пламени от пройденного расстояния.

В третьей серии расчетов рассмотрели динамику образования ударной волны при ускорении стехиометрического метано-воздушного пламени в трубе сложной геометрии, показанной на рис. 4. В такой трубе проводились эксперименты в лаборатории детонации ИХФ РАН. Труба состояла из форкамеры, расширительной секции с перфорированной перегородкой и длинной прямой цилиндрической трубы круглого сечения с участком, занятым регулярными кольцевыми препятствиями. Смесь зажигали у закрытого (левого) конца форкамеры. Другой конец трубы (правый) был открыт в атмосферу.



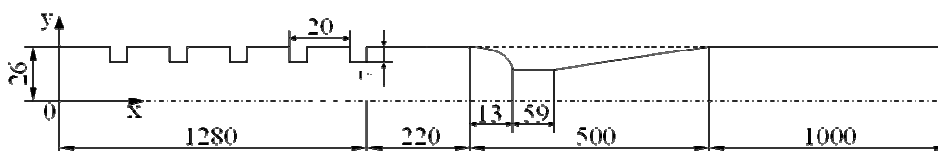
**Рис. 4** Конфигурации экспериментальной установки ИХФ РАН.



**Рис. 5** Сравнение расчетных и экспериментальных записей датчиков давления ДД3 – ДД5.

На рис. 5 представлено сравнение расчетных и экспериментальных записей датчиков давления ДД1 – ДД5 (см. рис. 4). Видно хорошее качественное и количественное согласие результатов. Отметим, что отклонение измеренной и расчетной скорости ударной волны на участке от датчика ДД1 до датчика ДД5 не превышало 15–20%.

Разработанную модель химически реагирующего течения применили для расчета ПГД в плоском полуоткрытом канале высотой 52 мм и длиной 3 м с ускорителем пламени (секция с регулярными кольцевыми препятствиями со степенью затенения 0.25 и шагом 20 мм) и фокусирующим устройством (сужающе-расширяющееся сопло длиной 0.5 м), показанном на рис. 6. В лаборатории детонации ИХФ РАН в трубе такой конфигурации экспериментально получен быстрый ПГД в стехиометрической пропано-воздушной смеси.



**Рис. 6** Схематичное изображение канала с ускорителем фронта пламени и фокусирующим устройством.

В расчетах в начальный момент времени смесь полностью заполняла канал, покоилась и находилась при нормальных условиях. Для моделирования «безграничной» атмосферы, окружающей канал, к его открытому концу

присоединяли большой буферный объем с воздухом, находящимся при давлении 1 атм. Смесь зажигали на расстоянии 1 см от закрытого конца трубы с помощью начального очага в виде круга диаметром 1 мм. Для расчета предпламенного самовоспламенения расчетную область перед фронтом пламени заполняли частицами. Среднее количество частиц в каждой вычислительной ячейке поддерживали на уровне 10, не допуская уменьшения количества частиц в ячейке меньше 5 и увеличения больше 20. Считали, что самовоспламенение газа в частице возникает, когда скорость нарастания температуры в ней превышала  $10^6$  К/с. Самовоспламенение одной частицы означало самовоспламенение смеси во всей ячейке, в которой находится данная частица.

Результаты расчетов оказались в качественном согласии с экспериментальными наблюдениями. После зажигания пламя сначала ускорялось до видимой скорости около 1000 м/с. Затем образованная ускоряющимся пламенем ударная волна, проходя через фокусирующее сопло, превращалась в пересжатую детонационную волну, а в дальнейшем – в квазистационарную волну детонации, распространяющуюся в гладкой секции канала. По результатам расчетов получена оценка удельного импульса силы, действующей на закрытый конец канала от начала процесса до завершения истечения продуктов реакции. Удельный импульс составил ~2500 с.

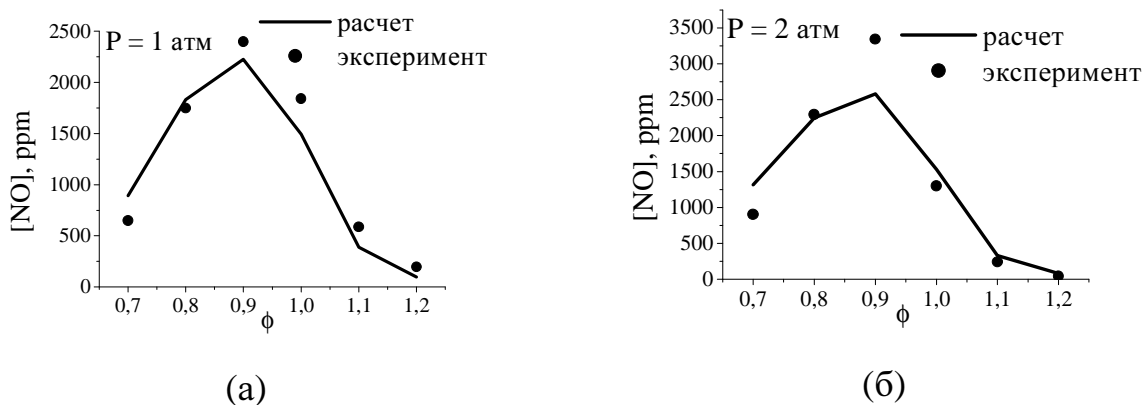
**Глава 4. Расчеты горения в закрытых сосудах.** В Главе 4 разработанную модель реагирующего течения применили к исследованию горения в закрытых сосудах. Сначала приведено описание результатов нестационарных трехмерных расчетов турбулентного горения пропано-воздушных смесей разного состава в цилиндрическом сосуде с учетом образования оксидов азота в пламени («быстрый» оксид азота) и в продуктах горения («термический» оксид азота). Затем приведено описание результатов расчетов предпламенного самовоспламенения при турбулентном горении стехиометрической водородо-воздушной смеси в сосудах разной геометрии.

Результаты нестационарных трехмерных расчетов турбулентного горения пропано-воздушных смесей в цилиндрическом сосуде диаметром 144.5 мм и высотой 150 мм сравнили с экспериментальными данными Хуссаина (Египет)

по зависимостям давления от времени и по суммарному выходу NO. При сравнении расчетных и измеренных кривых давления получено удовлетворительное качественное и количественное согласие результатов. Следует, однако, отметить, что значения максимального давления в расчетах и в опытах несколько отличаются, что связано с использованием грубой расчетной сетки, не позволяющей точно моделировать тепловые потери в стенку камеры сгорания.

На рис. 7 приведено сравнение расчетных и экспериментальных данных по выходу NO при горении пропано-воздушных смесей разного состава при начальном давлении 1 атм (рис. 7а) и 2 атм (рис. 7б). Видно, что ЯВП–МЧ-модель дает удовлетворительный количественный и качественный прогноз для выхода NO при горении в закрытом сосуде.

Для исследования особенностей предпламенного самовоспламенения при горении в закрытых сосудах разной геометрии провели нестационарные двумерные расчеты турбулентного горения стехиометрической водородо-воздушной смеси при повышенном начальном давлении (10 атм) и повышенной начальной температуре (850 и 900 К). Рассмотрены три типа закрытых сосудов: с цилиндрическим и квадратным сечением, а также сосуд квадратного сечения



**Рис. 7** Сравнение расчетных (линии) и экспериментальных (точки) зависимостей выхода оксида азота от состава смеси и начального давления.

с внутренней «комнатой». Объем всех сосудов был одинаков. Для моделирования предпламенного самовоспламенения разработан простой одноступенчатый кинетический механизм окисления водорода, хорошо согласующийся с

известными экспериментальными данными по задержкам самовоспламенения в выбранном диапазоне давлений (выше 10 атм) и температур (выше 850 К).

Результаты расчетов показали ряд новых возможностей и достоинств ЯВП–МЧ-модели. Как и в экспериментах, предпламенное самовоспламенение в новой модели имеет ярко выраженный очаговый характер, а видимая скорость распространения объемной реакции в предпламенной зоне определяется предысторией процесса горения, непостоянна по времени и неизотропна по пространству. Влияние предыстории процесса горения особенно проявляется при количественном сравнении результатов моделирования процесса горения в сосудах разной геометрии. Так, в цилиндрическом сосуде максимальная видимая (фазовая) скорость волны самовоспламенения в предпламенной зоне составила около 5 км/с, тогда как в сосуде квадратного сечения – около 20 км/с, а в сосуде с внутренней «комнатой» – около 50 км/с. Такое отличие связано с термоакустическими явлениями, в частности, с фокусирующим влиянием углов камеры сгорания на волны давления, порождаемые распространяющимся турбулентным пламенем.

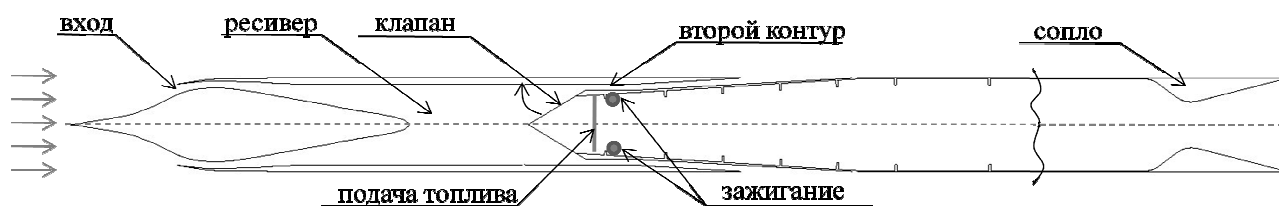
**Глава 5. Расчет течения в импульсном детонационном двигателе.** В Главе 5 с помощью разработанной модели химически реагирующего течения впервые поставлена и решена задача расчета тяговых характеристик воздушно-реактивного ИДД, работающего на углеводородном горючем (пропане) в режиме ПГД в условиях сверхзвукового полета.

На рис. 8 показана схема осесимметричного двухконтурного ИДД общей длиной 2.12 м и внешним диаметром  $d = 83$  мм в компоновке с входным устройством, ресивером, кольцевым обводным каналом (второй контур) и камерой сгорания (первый контур), оборудованной механическим клапаном и соплом. Двигатель, работающий на газообразном пропане, обдувается стационарным сверхзвуковым потоком воздуха с числом Маха  $M$  на высоте  $Z$ .

Сверхзвуковое входное устройство выполнено по схеме, предложенной в ЦАГИ. За входным устройством предусмотрен ресивер – цилиндрический объем, предназначенный для сглаживания волновых процессов, возникающих при открытии/закрытии клапана.



Камера сгорания ИДД (первый контур) представляет собой трубу, состоящую из двух секций – расширяющейся конической секции с максимальным диаметром 83 мм и цилиндрической секции такого же диаметра. На начальном участке в камере сгорания расположены регулярные препятствия в виде кольцевых вставок со степенью затенения сечения 0.3. Шаг установки препятствий в конической и цилиндрической частях равен 50 и 82 мм соответственно. Последнее препятствие установлено на расстоянии 510 мм от источника зажигания. За этим препятствием до самого сопла находится гладкая цилиндрическая секция трубы длиной 1000 мм. Левый конец камеры сгорания оборудован механическим клапаном. В положении, показанном на рис. 8, клапан закрыт, и весь поток воздуха, прошедшего через входное устройство и ресивер, направляется во второй контур. При открытом клапане весь поток воздуха направляется в камеру сгорания. Правый конец камеры сгорания оборудован сверхзвуковым соплом с диаметром критического сечения 42 мм.



**Рис. 8** ИДД со сверхзвуковым диффузором, вторым контуром, клапаном и выходным соплом.

Циклический рабочий процесс ИДД включает три стадии. На первой стадии, когда клапан открыт, камера сгорания заполняется топливно-воздушной смесью (ТВС). Горючее подается в некотором сечении, расположенном перед первым кольцевым препятствием. Чтобы исключить прямой контакт свежей ТВС с горячими продуктами горения предыдущего цикла, горючее подается в поток воздуха с некоторой временной задержкой по отношению к моменту открытия клапана.

Когда камера сгорания заполнена ТВС, клапан мгновенно закрывается, и начинается вторая стадия рабочего процесса. Горючая смесь сгорания зажигается кольцевым внешним источником в зоне обратных токов, образуемой за первым препятствием. Возникающее пламя, распространяясь в турбулентном

потоке ТВС, ускоряется и происходит ПГД. Образованная в результате ПГД детонационная волна распространяется вниз по течению и выходит через сопло в окружающую атмосферу.

Третья стадия рабочего процесса – истечение продуктов горения. Эта стадия продолжается до тех пор, пока давление на клапане со стороны камеры сгорания не уменьшится до некоторого заданного значения  $P_*$ , еще обеспечивающего положительное тяговое усилие. После достижения  $P_*$  клапан мгновенно открывается, и цикл повторяется.

Задача, которая решалась в диссертации, – расчет тяговых характеристик ИДД в компоновке с входным устройством и соплом в условиях сверхзвукового полета с учетом всех физико-химических особенностей окисления и горения пропана, а также конечного времени ускорения турбулентного пламени и ПГД. При численном решении задачи в момент зажигания перед фронтом пламени случайным образом разбрасывались частицы, используемые в МЧ для расчета предпламенных процессов. Средняя числовая плотность частиц составляла 10 частиц на ячейку. Уравнения МЧ решали по явной схеме с использованием генераторов случайных чисел.

В табл. 1 представлен пятиступенчатый глобальный кинетический механизм, использованный в ЯВП–МЧ-модели. Отметим, что кинетические параметры этого механизма (энергия активации  $E$  и предэкспоненциальный множитель  $A$ ) зависят от давления и состава смеси. При моделировании объемных реакций для реакции 1 брали разные значения  $E_1$  и  $A_1$  при температуре  $T < 775$  К и  $T > 775$  К. Такой прием позволял моделировать предпламенное двухстадийное самовоспламенение с возникновением «холодного» пламени и последующим горячим взрывом.

Таблица 1 Глобальный кинетический механизм окисления пропана

№	Реакция
1	$C_3H_8 + 3.5O_2 \rightarrow 3CO + 4H_2O$
2, 3	$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$
4	$H_2 + H_2 + O_2 \rightarrow H_2O + H_2O$
5	$CO + CO + O_2 \rightarrow CO_2 + CO_2$

Расчеты рабочего процесса в ИДД проведены для условий сверхзвукового полета с  $M = 3.0$  на высоте  $Z = 9.3$  и 16 км. Параметры воздуха на высоте 9.3 км: давление  $P_a = 0.29$  атм, температура  $T_a = 228$  К. На высоте 16 км те же параметры воздуха имеют значения 0.104 атм и 217 К соответственно. Для определения тяговых характеристик ИДД проводили сквозной расчет нескольких рабочих циклов с учетом внешнего обтекания двигателя. При расчете аэродинамического сопротивления учитывали как сопротивление давления, так и силу вязкого трения на всех твердых поверхностях ИДД.

Расчеты показали, что начальный период горения в ИДД развивается относительно медленно. Далее фронт пламени быстро ускоряется, формируя перед собой волну сжатия, а затем и ударную волну, которая впоследствии приводит к ПГД. Переход горения в детонацию происходит на расстоянии  $L_{DDT} \approx 400$  мм от источника зажигания, т.е.  $L_{DDT} \approx 4.8d$ . Образованная детонационная волна сначала распространяется в секции с препятствиями, а затем – в гладкой секции камеры сгорания. Подчеркнем, что давление и температура

ТВС в камере сгорания составляли  $\sim 5$  атм и  $\sim 500$  К. Кроме того, течение ТВС имело высокую степень турбулентности. Эти факторы существенно улучшали условия для ПГД по сравнению с нормальными условиями, в которых обычно проводятся лабораторные эксперименты по ПГД.

На рис. 9 представлена расчетная временная зависимость силы, действующей на ИДД в полете в течение трех рабочих циклов. Силу считали положительной, если она действовала против направления набегающего потока. Видно, что второй и третий циклы практически идентичны, т.е. рабочий процесс устанавливается после второго цикла. Следовательно, тяговые характеристики ИДД можно оценивать, начиная со второго цикла рабочего процесса двигателя.

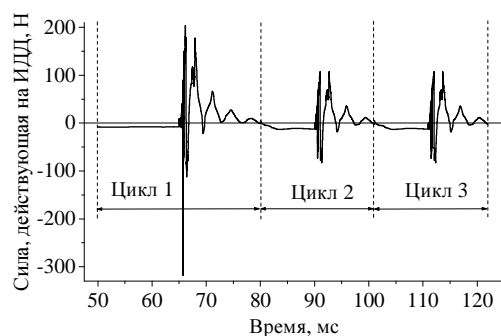
Интегрируя кривую, приведенную на рис. 9, можно рассчитать импульс силы для каждого рабочего цикла двигателя. Так, для второго цикла импульс силы положительный и составил  $\sim 0.043$  Н·с. Учитывая, что длительность цикла  $\tau_{cycle} = 21$  мс, для средней суммарной силы  $F$ , действующей на ИДД в полете, получаем  $F \approx 2.05$  Н. Подчеркнем, что эта сила складывается из силы тяги  $F_T$  и

силы аэродинамического сопротивления  $F_R$  двигателя:  $F = F_T - F_R$ . Поскольку сила  $F$  положительна, в рассматриваемых условиях ИДД может двигаться с ускорением.

Для определения силы тяги  $F_T$ , создаваемой ИДД, необходимо знать силу  $F_R$  его аэродинамического сопротивления в полете. Эту силу можно определить, решив ту же задачу, что и при построении рис. 9, но без зажигания ТВС. При этом есть два способа определить силу  $F_R$ : один – учесть, что при открытии клапана камера сгорания заполнена горячими продуктами предыдущего цикла (этот случай соответствует одному «пропуску» зажигания), другой – учесть, что при открытии клапана камера сгорания заполнена холодной ТВС (этот случай соответствует нескольким последовательным «пропускам» зажигания). Для второго рабочего цикла расчетный импульс силы аэродинамического сопротивления составил  $-0.17246$  Н·с и  $-0.19433$  Н·с соответственно. Учитывая, что  $\tau_{cycle} = 21$  мс, получим:  $F_{R,1} \approx -0.17246/0.021 = -8.21$  Н и  $F_{R,2} \approx -0.19433/0.021 = -9.25$  Н, где индексы 1 и 2 соответствуют первому и второму способу оценки  $F_R$ . Таким образом, при двух указанных способах оценки  $F_R$  сила тяги, создаваемая ИДД, составила  $F_{T,1} = F + F_{R,1} \approx 2.05 + 8.21 = 10.26$  Н и  $F_{T,2} = F + F_{R,2} \approx 2.05 + 9.25 = 11.3$  Н. Удельный импульс ИДД определяли по силе тяги  $F_T$  и по массовому расходу горючего за один рабочий цикл  $\dot{m}_f$  по формуле:

$$I_{sp} = \frac{F_T}{\dot{m}_f g},$$

где  $g$  – ускорение силы тяжести. Учитывая, что во втором рабочем цикле масса горючего в камере сгорания приблизительно составила  $1.28 \cdot 10^{-5}$  кг, и  $\tau_{cycle} = 21$  мс, получим:  $I_{sp,1} \approx 1720$  с и  $I_{sp,2} \approx 1890$  с. С учетом погрешности вычислений приходим к выводу, что удельный импульс ИДД при полете с  $M = 3.0$  на высоте  $Z = 9.3$  км составил  $I_{sp} = 1800 \pm 100$  с.



**Рис. 9** Расчетная зависимость полной силы, действующей на ИДД в полете на высоте 9.3 км, от времени в течение трех рабочих циклов.

Аналогичные расчеты проведены для условий полета такого же ИДД с  $M = 3.0$  на высоте  $Z = 16$  км. Оказалось, что в этих условиях  $I_{sp,1} \approx I_{sp,2} \approx 1700$  с. Это значение существенно выше удельного импульса, характерного для ПВРД на обычном горении (для выбранных условий полета по разным данным 1200–1500 с).

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

- (1) Разработана новая модель горения с явным выделением фронта пламени, сопряженная с методом частиц, учитывающая одновременное протекание фронтальных и объемных химических реакций.
- (2) Новая модель горения проверена на экспериментальных данных по ускорению пламени в гладких трубах, трубах с регулярными препятствиями и в камерах сгорания постоянного объема.
- (3) Впервые с помощью численного моделирования показано, что предпламенное самовоспламенение газа при горении в замкнутом объеме имеет ярко выраженный очаговый характер, причем видимая скорость распространения объемной реакции в предпламенной зоне определяется предысторией процесса горения, непостоянна по времени и неизотропна по пространству.
- (4) С помощью новой модели впервые проведен многомерный расчет ПГД в стехиометрической пропано-воздушной смеси в канале с ускорителем пламени в виде регулярных препятствий и фокусирующим элементом в виде

сопла. Показано, что удельный импульс силы, действующей на закрытый конец канала составляет ~2500 с.

- (5) С помощью новой модели впервые проведены многомерные расчеты нестационарного газодинамического течения в воздушно-реактивном ИДД, работающем в циклическом режиме на газообразном пропане, и его обтекания в условиях сверхзвукового полета с числом Маха 3.0 на высоте 9.3 и 16 км.
- (6) Впервые показано, что в воздушно-реактивном ИДД с длиной и диаметром тракта 2.12 м и 83 мм возможен циклический рабочий процесс с частотой 48 Гц с быстрым ПГД на расстоянии всего 5–6 калибров камеры сгорания.
- (7) Впервые показано, что удельный импульс воздушно-реактивного ИДД в условиях сверхзвукового полета с числом Маха 3.0 приблизительно составляет 1700 с, что существенно выше удельного импульса, характерного для ПВРД на обычном горении в тех же условиях полета (1200–1500 с).

#### **Список опубликованных работ**

1. Ivanov V.S., Frolov S.M., Basevich V.Ya., Smetanyuk V.A., Ermakov A.N., Ivanov A.A. Simulation of NO formation in the turbulent reactive flow by joint velocity – scalar pdf method. In: Nonequilibrium processes: Plasma, Combustion, Atmospheric Phenomena. Moscow, Torus Press, 2007, p. 35.
2. Иванов В.С., Басевич В.Я., Фролов С.М. Модель горения газов с выделением фронта пламени. В сб.: XIV Симпозиум по горению и взрыву. Черноголовка, Из-во ИПХФ РАН, 2008, с. 73.
3. Ivanov V.S., Smetanyuk V.A., Frolov S.M. Simulation of chemical processes in turbulent flow reactors by Monte Carlo method. In: Proc. 7th ISHPMIE, St. Petersburg, July 7-11, 2008, Vol. 1, pp. 217-222.
4. Иванов В.С., Фролов С.М., Гоц А.Н. Математическое моделирование турбулентных реагирующих течений методом совместных функций плотности распределения вероятностей скорости и скаляров. В сб. XXIII Международной конференции «Уравнения состояния вещества», Эльбрус, 2008.
5. Frolov S.M., Ivanov V.S., Smetanyuk V.A., Basara B., Suffa M. Numerical simulation of propane - air turbulent flame acceleration in straight tubes of different length. In: Nonequilibrium Phenomena: Plasma, Combustion, Atmosphere. Moscow, Torus Press, 2009, pp. 356-365.
6. Frolov S.M., Ivanov V.S., Smetanyuk V.A., Basara B., Suffa M., E. von Berg. Spray penetration and vaporization in Diesel engines: Numerical simulation and

- experiments. In: Nonequilibrium Phenomena: Plasma, Combustion, Atmosphere. Moscow, Torus Press, 2009, pp. 324-331.
7. Frolov S.M., Ivanov V.S., Smetanyuk V.A., Basara B. Tracking of propagating turbulent flames and autoignition in enclosure. In: Proc. XXII YUMV Int. Automotive Conf. "Science and Motor Vehicles," Belgrade, 2009, pp. 1-9.
  8. Иванов В.С., Сметанюк В.А., Фролов С.М. Численное моделирование гомогенного горения газов с выделением фронта пламени. В кн. тр. XXXIII академических чтений по космонавтике. М.: Комиссия РАН, 2009, с. 191-192.
  9. Иванов В.С., Сметанюк В.А., Фролов С.М. Математическое моделирование начальной стадии перехода горения в детонацию в трубе с гомогенной газовой смесью. В кн. Горение и взрыв. М. Торус Пресс, 2009, Вып. 2, с.18-21.
  10. Иванов В.С., Скрипник А.А., Сметанюк В.А., Фролов С.М. Численная оптимизация устройств - ускорителей пламени. В кн. тр. XXXIV академических чтений по космонавтике. М.: Комиссия РАН, 2010.
  11. Сметанюк В.А., Иванов В.С., Фролов С.М. Трехмерная модель горения с выделением фронта пламени. В кн. тр. XXXIV академических чтений по космонавтике. М.: Комиссия РАН, 2010.
  12. Иванов В.С., Фролов С.М. Математическое моделирование распространения пламени в гладких трубах и трубах с регулярными препятствиями. Пожаровзрывобезопасность, 2010, том 19, № 1, с. 14–19.
  13. Иванов В.С., Фролов С.М. Математическое моделирование перехода горения в детонацию в трубе со спиралью Щелкина и фокусирующим устройством. В кн. Горение и взрыв. М.: Торус Пресс, 2010, Вып. 3, с. 63–70.
  14. Иванов В.С. Математическое моделирование перехода горения в детонацию методом выделения фронта пламени и методом частиц Сб. трудов научной сессии МИФИ-2010, М.: МИФИ, 2010.
  15. Frolov S.M., Ivanov V.S. Turbulent combustion with localized preflame autoignition of hydrogen – air mixture in an enclosure. In: AIS-2010 "Atmosphere, Ionosphere, Safety. Kaliningrad: KSU Publ., 2010, pp. 66-69.
  16. Frolov S.M., Ivanov V.S., Basara B., Suffa M. Particle methods in turbulent combustion: Numerical simulation of pollutant formation. In: AIS-2010 "Atmosphere, Ionosphere, Safety. Kaliningrad: KSU Publ., 2010, pp. 25-28.
  17. Aksenov V.S., Frolov S.M., Ivanov V.S., Mailkov A.E., Skripnik A.A., Smetanyuk V.A. Experimental studies of methane – air flame acceleration in tubes with obstacles. In: AIS-2010 "Atmosphere, Ionosphere, Safety. Kaliningrad: KSU Publ., 2010, pp. 69-71.
  18. Frolov S.M., Ivanov V.S., Basara B., Suffa M. Numerical simulation of localized preflame autoignition in enclosures. In: Proc. 8th ISHPMIE, Iokohama, Japan, 2010, paper ISH036.
  19. Frolov S.M., Ivanov V.S. Combined flame tracking-particle method for numerical simulation of deflagration-to-detonation transition. Deflagrative and detonative combustion. Moscow: Torus press, 2010, pp. 133-155.

20. Frolov S.M., Ivanov V.S., Mailkov A.E., Smetanyuk V.A. Experimental and numerical investigation of flame acceleration in natural gas-air mixture. In: ICPCD-2010, p. 8.
21. Frolov S.M., Aksenov V.S., Ivanov V.S., Medvedev S.N., Skripnik A.A., Smetanyuk V.A. Experimental study of deflagration-to-detonation transition in natural gas-air mixture. In: ICPCD-2010, p. 8.
22. Frolov S.M., Ivanov V.S. Numerical simulation of pulse operation and performance of a single-tube air-breathing PDE in flight conditions. In: ICPCD-2010, p. 26.
23. Иванов В.С., Фролов С.М. Математическое моделирование рабочего процесса и тяговых характеристик воздушно-реактивного импульсного детонационного двигателя в условиях сверхзвукового полета. Химическая физика, 2011 (принята в печать).