ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

УДК 534.222.2

## ИНИЦИИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ В ТРУБЕ С ПРОФИЛИРОВАННЫМ ЦЕНТРАЛЬНЫМ ТЕЛОМ

© 2011 г. С. М. Фролов, И. О. Шамшин, С. Н. Медведев, А. В. Дубровский

Представлено академиком А.А. Берлиным 18.02.2011 г.

Поступило 21.02.2011 г.

С помощью численного моделирования распространения ударной волны (УВ) в трубе с центральным телом (ЦТ) доказана возможность существенного облегчения перехода горения в детонацию (ПГД) в метановоздушной смеси. Показано, что ЦТ должно удовлетворять определенным требованиям: перекрывать сечение трубы приблизительно на 60%, иметь параболический профиль головной части с углом атаки ~40° и параболический или эллиптический профиль хвостовой части с углом схождения не более 7°. В этом случае детонацию можно инициировать УВ с числом Маха 3.5 на длине ~0.5 м за время ~0.2 мс.

Детонационное горение – способ прямого сжигания вещества, который теоретически позволяет повысить термодинамический коэффициент полезного действия технологических горелок и реактивных двигателей летательных аппаратов [1, 2]. Преимущество импульсно-детонационного горения - сочетание высокой мощности энерговыделения 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 [3].

Основная проблема реализации процесса импульсно-детонационного горения природного газа связана с его низкой детонационной способностью. Поэтому в качестве способа инициирования детонации рассматривают ПГД. В [4] для осуществления быстрого ПГД предложено использовать специальные устройства для ускорения пламени в комбинации с устройствами, фокусирующими ударные волны, бегущие перед пламенем. В [5] в качестве фокусирующего устройства для организации ПГД в метано-воздушной смеси использовалось суживающе-расширяющееся сопло. Показано, что установка в трубе сопла специальной формы позволяет обеспечить переход УВ в детонацию в стехиометрической смеси природного газа с воздухом при нормальных условиях и скорости УВ на входе в сопло выше  $1150 \pm 30$  м/с, что приблизительно соответствует числу Маха 3.3–3.5.

В отличие от [5] в настоящей работе для тех же целей предлагается использовать профилированное ЦТ. Работа посвящена поиску оптимальной формы ЦТ для импульсной детонационной установки с быстрым ПГД в метано-воздушной смеси. Поиск оптимальной формы ЦТ проводили с помощью численного моделирования дифракции относительно слабой УВ на ЦТ, размещенном в прямой трубе круглого сечения.

На рис. 1 показана схема расчетной области. В трубе диаметром *D* расположено ЦТ диаметром *d*. Центральное тело состоит из лобовой части, имеющей параболический или конический профиль с углом атаки  $\alpha$ , цилиндрической вставки длиной *L* и хвостовой части, имеющей конический или эллиптический профиль с углом схождения  $\beta$ . Степень перекрытия поперечного сечения трубы телом задается коэффициентом  $\delta = (d/D)^2$ . В начальный момент времени труба заполнена стехиометрической метано-воздушной смесью при нормальных условиях. Плоская УВ с числом Маха  $M_0$  создается путем задания на левой границе расчетной области соответствующих значений давления, плотности и скорости.

В результате расчета дифракции УВ на ЦТ определяется возможность возникновения детонации в области за телом. Цель расчетов – подобрать такие параметры ЦТ ( $\delta$ , L,  $\alpha$ ,  $\beta$ , форма профиля), при которых инициирование детонации максимально облегчается, т.е. достигается при наименьшем значении  $M_0$ .

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

 $\left[\rho r\right]_{t} + \left[\rho u r\right]_{z} + \left[\rho v r\right]_{r} = 0,$ 

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской Академии наук, Москва



Рис. 1. Схема расчетной области.

$$[\rho ur]_{t} + [(\rho u^{2} + p)r]_{z} + [\rho uvr]_{r} = 0,$$
  

$$[\rho vr]_{t} + [\rho uvr]_{z} + [(\rho v^{2} + p)r]_{r} = p,$$
  

$$[Er]_{t} + [(E + p)ur]_{z} + [(E + p)vr]_{r} = r\dot{Q},$$
  

$$[\rho Y_{i}r]_{t} + [\rho Y_{i}ur]_{z} + [\rho Y_{i}vr]_{r} = rJ_{i},$$

где *t* – время, *z* и *r* – продольная и радиальная координаты,  $\rho$  – плотность газа,  $Y_j$  – массовая доля *i*-го вещества, *u* и *v* – продольная и радиальная составляющие вектора скорости, *p* – давление,  $E = \rho(e + (u^2 + v^2)/2)$  – полная удельная энергия  $\left(e = \int_{0}^{T} C_v(T) dT$  – внутренняя энергия газа $\right), C_v(T) =$  $= \sum_{0}^{N_g} Y_i C_{vi}(T)$  – удельная теплоемкость газа, кото-

рую рассчитывали по известным зависимостям удельной теплоемкости веществ от температуры [6],  $N_g$  – общее число компонентов в смеси.

Систему уравнений 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,  $\mu_i$  — молекулярная масса *i*-го вещества.

Источники массы  $J_i$  и тепла  $\dot{Q}$  определяли по известным скоростям химических реакций  $w_k$  и энтальпиям образования веществ  $\Delta H_i^0$ :

$$J_{i} = \mu_{i} \sum_{k=1}^{N_{r}} (\nu_{ik}'' - \nu_{ik}') w_{k},$$
$$\dot{Q} = \sum_{k=1}^{N_{r}} w_{k} Q_{k}, \quad Q_{k} = \sum_{i=1}^{N_{g}} (\nu_{ik}' - \nu_{ik}') \Delta H_{i}^{0},$$

 $N_r$  — общее число реакций в смеси.

Химические превращения описывали реакциями вида:

$$\sum_{i=1}^{N_g} \mathbf{v}'_{ik} A_{ik} \xrightarrow{k} \sum_{j=1}^{N_g} \mathbf{v}''_{jk} B_{jk},,$$

где  $A_{ik}$  и  $B_{jk}$  – исходные реагенты и продукты k-й реакции, а  $v'_{ik}$ ,  $v''_{jk}$  – их стехиометрические коэффициенты соответственно; Скорости химических реакций рассчитывали по известной формуле:

$$w_{k} = A_{k} (p/p_{0})^{m_{k}} \exp(-(E_{a})_{k}/RT) \prod_{i=1}^{N_{g}} (\rho Y_{i} \mu_{i}^{-1})^{\nu_{h}}$$

где  $A_k$  — предэкспоненциальный множитель,  $(E_a)_k$  — энергия активации,  $m_k$  — параметр, учитывающий изменение скорости реакции с давлением,  $p_0$  — атмосферное давление.

В расчетах использовали глобальный кинетический механизм окисления метана [7], содержащий пять реакций с участием шести компонентов (CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub>, CO, H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>O). Предварительно проверено, что механизм [7] 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. Подсистема уравнений, описывающая конвективный перенос и работу сил давления, решается методом Годунова-Колгана. Подсистема обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающая химические реакции, решается явным методом Рунге-Кутта 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 интерфейса передачи сообщений (MPI) для ускорения вычислений на многопроцессорных компьютерах.

Расчеты проведены для трубы диаметром D = 97 мм. Длина расчетной области -1 м. Разност-

ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК том 438 № 5 2011



**Рис. 2.** Полутеневые профили градиента плотности. Время, мс: 0.200 (а), 0.300 (б), 0.350 (в), 0.400 (г), 0.425 (д), 0.450 (е), 0.520 (ж).

ная сетка – равномерная с шагом 0.2 мм. Опыты и расчеты с профилированными соплами [5, 8] показали, что инициирование детонации максимально облегчается при степени сужения сечения ~0.7. Принимая этот факт во внимание, расчеты с ЦТ были также проведены для  $\delta = 0.6 - 0.7$ . В ходе предварительных расчетов ( $L = 1 \text{ м}, \beta = 90^{\circ}$ ) установлено, что инициирование детонации максимально облегчалось при дифракции УВ на ЦТ с параболическим профилем лобовой части и  $\alpha \approx$ ≈ 40-45°. При прочих равных условиях детонация в трубе с ЦТ с коническим или параболическим профилем хвостовой части инициировалась легче при  $\delta = 0.6$  и 0.7 соответственно (в обоих случаях значения β изменялись от 3 до 7°). Число Маха инициирующей УВ изменяли в диапазоне от 3.0 до 3.8. Эти значения существенно ниже, чем число Маха детонации Чепмена-Жуге, приблизительно равное 5.3.

В расчетах инициирование детонации достигнуто при  $M_0 \ge 3.5$  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 ( $\beta \le 7^{\circ}$ ). При минимальном значении  $M_0$  детонационный взрыв происходил в хвостовой части ЦТ после серии отражений УВ от поверхности тела и трубы. Как правило, инициирование детонационной волны проходило через стадию пересжатой детонации, т.е. в переходный период скорость лидирующего фронта волны *V* была

больше термодинамической скорости детонации  $V_{CJ}$  ( $V/V_{CJ} = 1.2-1.4$ ). При этом на фронте детонационной волны всегда наблюдались "горячие точки", образовавшиеся в результате столкновения поперечных волн.

На рис. 2 приведен пример расчета инициирования детонации при дифракции УВ с  $M_0 = 3.5$  на ЦТ с параболическими профилями головной и хвостовой части ( $\alpha = 40^{\circ}, \beta = 7^{\circ}, L = 60$  мм,  $\delta = 0.6$ ). В этом примере пересжатая детонационная волна возникает в виде нового газодинамического разрыва за инициирующей УВ, претерпевшей дифракцию (рис. 2в). На рис. 2г оба разрыва сливаются, образуя единый фронт детонации, который в дальнейшем распространяется в самоподдерживающемся режиме. В итоге инициирующая УВ с числом Маха 3.5 превращается в детонацию за время ~0.2 мс на расстоянии ~0.5 м. Подчеркнем, что в расчетах распространения такой же УВ в трубе без ЦТ никакой сколь-нибудь заметной химической активности в ударно-сжатой смеси не обнаружено.

Таким образом, в результате численного моделирования распространения УВ в трубе с ЦТ доказана возможность сокращения расстояния и времени ПГД в метано-воздушной смеси. Показано, что ЦТ должно удовлетворять определенным требованиям: перекрывать сечение трубы с  $\delta \approx 0.6$ , иметь параболический профиль головной части с углом  $\alpha \approx 40^{\circ}$  и параболический или эллиптический профиль хвостовой части с углом  $\beta$  не более 7°. Минимальная интенсивность УВ, требуемая для инициирования детонации, оказалась приблизительно на том же уровне, что и при использовании фокусирующего сопла [5, 8]. Однако возможность использования ЦТ существенно расширяет круг конструктивных решений при проектировании импульсно-детонационных горелочных устройств на природном газе.

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 и Президиума Российской Академии наук (программа № 22).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Зельдович Я. Б. // ЖТФ. 1940. Т. 10. В. 17. С. 1453— 1461.
- 2. Фролов С. М., Барыкин А. Е., Борисов А. А. // Хим. физика. 2004. Т. 23. № 3. С. 17—25.
- 3. *Фролов С.М., Аксенов В.С., Иванов В.С. и др. //* Горение и взрыв. 2011. В. 4. С. 101–107.
- 4. *Фролов С.М.* // Хим. физика. 2008. Т. 27. № 6. С. 31– 44.
- 5. Фролов С.М., Аксенов В.С., Скрипник А.А. // ДАН. 2011. Т. 436. № 3. С. 346–350.
- JANAF: Thermochemical Tables. 2nd ed. US. Wash. (D.C.): Dept. Commerce; Nat. Bureau Standards 1970.
- 7. Басевич В.Я., Фролов С.М. // Хим. физика. 2006. Т. 25. № 6. С. 54—62.
- Semenov I.V., Utkin P.S., Markov V.V., et al. // Combust. Sci. and Technol. 2010. V. 182. P. 1735–1746.