

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

Михальченко Елена Викторовна

**Управление процессами детонации: ингибирование и
инициирование в каналах**

Специальность 1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2026

Диссертация подготовлена в Федеральном научном центре Научно-исследовательском институте системных исследований Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”.

Научный руководитель: **Смирнов Николай Николаевич**
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: **Туник Юрий Владимирович**,
доктор физико-математических наук, доцент,
Научно-исследовательский институт механики МГУ имени М.В. Ломоносова, лаборатория кинетических процессов в газах, ведущий научный сотрудник

Власенко Владимир Викторович,
доктор физико-математических наук, доцент,
Центральный аэрогидродинамический институт имени профессора Н.Е. Жуковского, лаборатория физического и численного моделирования течений с горением в двигателях перспективных летательных аппаратов, заместитель начальника лаборатории

Киверин Алексей Дмитриевич,
доктор физико-математических наук,
Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, лаборатория вычислительной физики, главный научный сотрудник

Защита состоится “23” октября 2026 г. в 15 ч. 00 минут на заседании диссертационного совета МГУ.011.5 Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова по адресу: 119192, Москва, Мичуринский проспект, д. 1, НИИ механики МГУ, кинозал.

Email: vasiliy_ksnk@mail.ru.

С диссертацией можно ознакомиться в в отделе диссертаций Научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д. 27) и на портале: <https://dissovet.msu.ru/dissertation/3987>.

Автореферат разослан “__” _____ 2026 года.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук

В.В. Косьянчук

Общая характеристика работы

Актуальность темы. В настоящее время в мире возрос интерес к экспериментальному и теоретическому исследованию, в том числе численными методами, многомерных детонационных волн: двумерной и трёхмерной ячеистой детонации, спиновых и непрерывно вращающихся волн.

Настоящая диссертация посвящена численному исследованию детонационных процессов в горючих газовых смесях, прежде всего, на основе водорода, охватывающему фундаментальные и прикладные аспекты этого явления. Работа последовательно развивается от изучения базовой структуры детонации к методам её контроля и далее к применению в перспективных энергетических установках. Первая часть работы направлена на исследование ячеистой структуры детонационной волны в водородно-воздушных смесях, верификацию детализированных кинетических механизмов и анализ влияния начальных условий и геометрии канала. Во второй части рассматривается критически важная прикладная задача — исследование химических методов подавления детонации путём добавления ингибиторов, что составляет научную основу для повышения взрывобезопасности объектов водородной энергетики. Третья часть фокусируется на исследовании трёхмерных детонационных волн в каналах различной геометрии, заполненных смесями водорода и ацетилена с окислителями.

Исследования методов управления детонацией в части предотвращения перехода горения в детонацию, а также её ослабления и подавления важны для разработки методов предотвращения неконтролируемых взрывов при транспортировке и хранении горючих смесей, а также на промышленных объектах. Случайные взрывы, связанные с процессами перехода горения в детонацию, представляют реальную опасность для современной промышленности, техники, эксплуатации стратегических объектов и т. д. Одним из эффективных методов управления процессами горения и детонации является использование специальных ингибирующих химических добавок, в частности добавок пропилена. Это позволяет не просто снижать ущерб от взрыва, а предотвращать само его возникновение за счёт разрыва цепных реакций или изменения теплового баланса системы на начальной стадии.

Степень разработанности темы. В области структуры детонационных волн, ингибирования детонации и исследований волн с вращающейся детонацией значительные результаты получены авторами и коллективами авторов: Щелкин К.И., Солоухин Р.И., Васильев А.А., Трошин Я.К., Денисов Ю.Н., Войцеховский Б.В., Черный Г. Г., Коробейников В. П., Левин В. А., Марков В.В., Мануйлович И. С., Смирнов Н.Н., Никитин В.Ф., Быковский Ф.А., Ждан С. А., Семенов Н.Н., Азатян В.В.,

Медведев С.М., Тереза А.М., Туник Ю.В., Гамезо В.Н., Фролов С.М., Ведерников Е. Ф., Власенко В.В., Шамшин И.О., Субботин В.А., Митрофанов В.В., П. Волански, Коробейничев О.П., Головастов С.В.

Хотя существующие работы существенно углубили понимание характеристик многомерных волн детонации и процессов горения, сохраняются критические пробелы. К ним относятся, например, поиск пределов детонации различных составов, эффективных методик инициирования, стабилизации и подавления детонации. Решить эти проблемы с высокой степенью достоверности позволяют современные численные методы исследования быстропротекающих физико-химических процессов. Эти проблемы носят комплексный характер, и их необходимо решать с учётом имеющихся современных экспериментальных данных и данных по кинетике химических процессов.

Цели и задачи работы.

- определить влияние кинетического механизма на размер детонационной ячейки в водородно-воздушной смеси, провести сравнение с экспериментальными данными;
- установить степень влияния добавки пропилена в качестве ингибитора на развитую детонационную волну и эффективность подавления детонации;
- предложить сокращённый кинетический механизм горения ацетиленов и провести тестирование с использованием расширенного механизма по временам задержек воспламенения;
- провести численное исследование инициирования и формирования вращающейся детонации в трёхмерном канале в зависимости от геометрических параметров канала, составов смеси, параметров торможения, внешнего давления и провести сравнение с экспериментальными данными.

Для выполнения поставленных целей ставятся следующие задачи:

1. Разработка двумерной и трёхмерной нестационарной математической модели для расчёта течений газовых смесей с химическими превращениями и её численная реализация.
2. Провести сравнительные расчёты ячеистой структуры детонации для различных кинетических механизмов с целью выявления оптимального кинетического механизма путём сравнения с экспериментальными данными.
3. Провести численные расчёты задач о ячеистой детонации с добавкой пропилена в качестве ингибитора для определения эффективности использования пропилена для подавления детонации и провести сравнение с экспериментальными данными.
4. Разработать сокращённый кинетический механизм горения ацетиленов и провести его верификацию путём сравнения рассчитанных времён задержки воспламенения с результатами, полученными с использованием детального расширенного механизма в диапазоне температур, давлений и коэффициентов избытка окислителя.

5. Провести расчёты формирования и распространения вращающейся детонации в трёхмерных каналах в смесях водорода и ацетилен с окислителями (кислород, воздух) в зависимости от геометрических параметров канала, составов смеси, параметров торможения, внешнего давления и провести сравнение с экспериментом.

Научная новизна:

1. При моделировании смеси водород–воздух на основании рассмотрения шести различных кинетических механизмов и определения их влияния на ячеистую структуру детонации выделен кинетический механизм, позволяющий достичь лучшего согласия с экспериментальными данными.
2. Для смеси ацетилен–кислород разработан авторский сокращённый кинетический механизм.
3. Впервые в результате численного исследования установлено влияние малой добавки пропилена C_3H_6 на скорость детонации и полное затухание детонационной волны за счёт укрупнения детонационных ячеек и разрушения ячеистой структуры, что согласуется с экспериментальными выводами о влиянии присадки ингибитора на основе пропилена.
4. Построена обобщающая диаграмма (“полуостров детонации”) для определения критической концентрации ингибитора. Установлены границы применимости сокращённых и расширенных кинетических механизмов для моделирования распространения детонационных волн в смесях водорода с воздухом.
5. На основании проведенного исследования вращающейся детонационной волны в канале предложен новый способ ее стабилизации за счёт дополнительной инъекции окислителя через боковые стенки канала.
6. Предложен оригинальный метод инициирования детонационной волны с заданным направлением вращения.
7. Установлено, что в результате инициирования детонации в бедной или богатой горючей смеси стабильно формируется вращающаяся волна, а в стехиометрической смеси формированию постоянно вращающейся детонационной волны препятствуют возникающие на ее пути очаги горения из за которых детонация гаснет.
8. Получено, что при детонации в бедной смеси максимальный удельный импульс получается при дополнительной инъекции воздуха через боковые стенки канала, а в богатой смеси максимальная реактивная сила - при инъекции кислорода.

Теоретическая и практическая значимость. Теоретическая значимость исследования заключается в существенном углублении фундаментальных представлений о физико-химических механизмах детонационного горения. Работа вносит вклад в теорию детонации новыми результатами численного исследования формирования ячеистой структуры волны, среди которых установленные количественных закономерностей влияния на нее начальных параметров и геометрии области течения.

Значимым теоретическим результатом является верификация и сопоставление детализированных и сокращённых кинетических механизмов окисления водорода и углеводородов в условиях детонации, позволившие определить границы применимости упрощённых моделей для описания сложного нестационарного процесса. Предложен и обоснован новый подход к управлению детонацией через радикальный обрыв цепных реакций путём исследования влияния ингибиторов на устойчивость волны и концентрационные пределы ее распространения.

Практическая значимость работы определяется тем, что полученные результаты формируют научную базу для повышения взрывобезопасности объектов водородной инфраструктуры. Разработанные и верифицированные модели позволяют проводить инженерные расчёты опасных сценариев, а выявленные закономерности эффективности химического ингибирования создают основу для разработки конкретных систем пассивной или активной защиты. Работа вносит вклад в развитие практического использования вращающихся волн детонации в установках высокоскоростного сжигания газовых смесей. Таким образом, диссертация соединяет фундаментальное изучение явления с конкретными приложениями в сферах безопасности и перспективных энергетических технологий, предлагая инструменты как для предотвращения нежелательной детонации, так и для её эффективного использования.

Методология и методы исследования. Методология исследования основана на вычислительном эксперименте с использованием математического моделирования реагирующих течений. Математическая модель базируется на системе дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих законы сохранения массы, импульса и энергии, изменение состава за счёт химических реакций, а также дополненных моделью турбулентности, алгебраическими соотношениями и уравнением состояния с соответствующими начальными и граничными условиями.

Численная реализация поставленной задачи осуществлялась с использованием конечно-разностного метода на регулярных сетках. Для обеспечения высокого разрешения разрывов и контактных поверхностей применялась явная схема второго порядка точности как по пространству, так и по времени. Повышение порядка аппроксимации достигалось за счёт MUSCL-интерполяции (Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws) переменных на грани ячеек при расчёте конвективных потоков. Выбор направления интерполяции и непосредственно расчёт конвективных членов выполнялся с помощью метода AUSM+ (Advection Upstream Splitting Method), который позволяет точно моделировать ударно-волновые структуры, характерные для детонационных течений.

Для решения жёсткой системы кинетических уравнений, моделирующих химические реакции, был реализован модифицированный метод

Новикова, обеспечивающий устойчивость и точность решения в условиях существенно различающихся временных масштабов протекания реакций.

Достоверность полученных результатов и адекватность разработанных программных кодов обосновывается их сравнением с экспериментальными данными.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Наилучшее соответствие расчетных данных экспериментальным результатам при решении задач пространственного разрешения детонационной ячейки в водородно-воздушных смесях обеспечивает кинетический механизм реакций, разрабатываемый в ФИЦ ХФ РАН им. Н.Н. Семенова.
2. Введение малой добавки пропилена (2–3%) в качестве ингибитора приводит к снижению скорости детонационной волны, подавлению детонационного режима, увеличению размера детонационных ячеек и нарушению целостности ячеистой структуры.
3. Посредством неравномерного заполнения канала горючей смесью может быть задано необходимое направление распространения детонационной волны. Стабилизация детонационной волны в кольцевом канале может быть достигнута за счет дополнительной инъекции кислорода или воздуха через боковые стенки канала.
4. В кольцевом канале детонационный режим наименее устойчив в стехиометрической смеси, однако его стабилизация достигается боковой подачей воздуха или кислорода.
5. Сокращенная авторская кинетическая модель позволяет получать результаты, адекватные экспериментальным данным, и обладает достаточной точностью для применения в расчетных задачах.

Достоверность результатов. Обоснованность выводов работы обеспечивается строгим математическим аппаратом, основанным на фундаментальных законах сохранения и уравнениях механики реагирующих смесей, а также корректными начальными и граничными условиями. Применяемые численные методы являются стандартными и хорошо зарекомендовавшими себя в вычислительной физике.

Адекватность используемых моделей, численных методов и полученных результатов физическим процессам подтверждена сравнением с данными натурных экспериментов.

Апробация работы. Основные результаты докладывались на следующих международных и всероссийских конференциях: XI – XIII Всероссийских съездах по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (Казань, 2015; Уфа, 2019; Санкт-Петербург, 2023); XVI Международная суперкомпьютерная конференция “Научный сервис в сети Интернет: многообразие суперкомпьютерных миров” (Новороссийск, 2014); Международная конференция “Суперкомпьютерные дни в России” (Москва, 2015, 2018, 2021, 2023 - 2025); XVI Международная конференция “Супервычисления и математическое моделирование” (Саров, 2016);

IV, VI Минский международный colloquium по физике ударных волн, горения и детонации (Минск, Беларусь, 2015, 2019); . Ломоносовские чтения, МГУ им. М.В. Ломоносова (Москва, 2016, 2017, 2019 – 2025); XXV Всероссийский семинар с международным участием по струйным, отрывным и нестационарным течениям (Санкт-Петербург, 2018); 69, 71-72, 74, 76 International Astronautical Congress, (Бремен, Германия, 2018; Дубай, О.А.Э., 2020, 2021; Баку, Азербайджан, 2023; Сидней, Австралия, 2025); Conference on Computational Mechanics (Санья, Китай, 2024); VIII Форум «ИТ на службе оборонно-промышленного комплекса» (Екатеринбург, 2019); Международная конференция «Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе», посвященная дню рождения великого русского математика академика П.Л. Чебышёва (Обнинск 2019, 2021); 27th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS) (Пекин, Китай, 2019); XX Всероссийская конференция молодых учёных по математическому моделированию и информационным технологиям (Новосибирск, 2019); Non-linear phenomena and dynamics of flame propagation: theoretical aspects and implementations (Боровое (Бурбай), Казахстан, 2022); 48 - 50 International Summer School-Conference “Advanced Problems in Mechanics” (Санкт-Петербург, 2020-2022); Международная конференция “Математическое моделирование”, Международный авиационно-космический салон МАКС-2021 (Москва, 2021); XXIII Международная научно-техническая конференция “Нейроинформатика-2021” (Москва, 2021); XII Международный энергетический Форум «Инновации. Инфраструктура. Безопасность» (Москва, 2020); XV - XVII Всероссийский симпозиум по горению и взрыву (Суздаль, 2020, 2022, 2024); XI Всероссийская конференция с международным участием “Торение топлива: теория, эксперимент, приложения” (Новосибирск, 2021); International Workshop on Explosions and Reactive Flows (Пекин, Китай, 2022); XVI Минский международный форум по тепломассообмену (Минск, Беларусь, 2022); 2nd Global Summit and Expo on Aerospace and Mechanical Engineering (Дубай, О.А.Э., 2022); 2d International Conference on Physics and Chemistry of Combustion and Processes in Extreme Environments (ComPhysChem’22) (Самара, 2022); 10-11 Международный симпозиум по безопасности космических полетов (Санкт Петербург, 2023, 2024, 2025, 2026); 21-я научно-техническая конференция «МОЛОДЕЖЬ В НАУКЕ» (Саров, 2023); Всероссийская конференция молодых ученых-механиков YSM (Сочи, 2022 - 2025)

Личный вклад. Диссертантом лично получены все выносимые на защиту научные результаты. Совместно с научным руководителем сформулированы постановки задач. Непосредственно автором выполнена программная реализация ключевых алгоритмов и модификация вычислительного кода, обеспечившая проведение исследований; осуществлены все расчеты, обработка и анализ данных. Подготовка текстов статей и их сопровождение при публикации выполнены соискателем.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 8 публикациях в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы. Зарегистрированы 1 патент¹ и 1 программа для ЭВМ².

Основное содержание работы

Во введении обосновывается актуальность исследований, выполненных в рамках диссертационной работы, формулируется цель и ставятся задачи работы, излагается научная новизна, теоретическая и практическая значимость результатов, оценивается степень разработанности темы, описывается методология и методы исследования, а также изложены положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена рассмотрению основных этапов исследования детонации в газовых смесях. Известно, что горение может протекать в двух режимах: дефлаграция и детонация. Рассмотрены ключевые работы по гидродинамической теории детонации: В.А. Михельсона, Д.Л. Чепмена, Э. Жуге (теория Чепмена–Жуге), а также модель Зельдовича–Неймана–Дёринга (ЗНД), описывающая структуру детонационного фронта с зоной индукции. Указана роль численного моделирования, начиная с 1960-х годов, и проблема выбора кинетических механизмов.

Описана ячеистая структура детонационной волны, наблюдаемая на сажевых отпечатках. Детонационные ячейки являются следствием неустойчивости фронта и взаимодействия поперечных волн. Выделены регулярные и нерегулярные структуры, их связь с энергией активации и условиями распространения. Размер ячейки служит важной характеристикой, коррелирующей с критической энергией инициирования и другими параметрами.

Рассмотрено ингибирование детонации как способ предотвращения неконтролируемых взрывов, особенно актуальный для смеси водорода с окислителем. Отмечено, что традиционные ингибиторы эффективны для дефлаграции, но не успевают смешаться со смесью при детонации из-за её сверхзвуковой скорости. Перспективным направлением является

¹ Заявка 2020134379 Рос. федерация, МПК⁷ F 23 C 99/00. Способ организации процесса сгорания в камере воздушно-реактивного двигателя / Н. Н. Смирнов и др. (Российская Федерация) ; ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН (RU). № 2807130 ; заявл. 09.11.2023 ; опубл. 28.12.2022, Бюл. № 31, 2022134936 (Рос. Федерация).

² Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ. Программа для моделирования влияния ингибитора на структуру детонационной волны в водородно-воздушных смесях / Н. Н. Смирнов и др. ; Федеральное государственное автономное учреждение Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Национального исследовательского центра “Курчатовский институт” (RU). № 2025680530 ; заявл. 06.08.2025 ; опубл. 06.08.2025, 2025660753 (Рос. Федерация).

предварительное смешение с топливом ненасыщенных углеводородов, поглощающих атомарный водород и замедляющих цепную реакцию.

Изложены проблемы, связанные с вращающейся детонационной волной. Приведена история исследований от работ Я.Б. Зельдовича и Б.В. Войцеховского. Указаны нерешённые проблемы, связанные с реализацией непрерывно вращающейся детонационной волны.

Вторая глава посвящена численному исследованию ячеистой структуры детонационной волны в смесях водорода с воздухом. Основная цель главы заключалась в сопоставлении различных детализированных кинетических механизмов горения водорода при моделировании детонации с целью выбора наиболее подходящего механизма для моделирования ячеистой детонации и в изучении определяющих параметров, влияющих на её структуру.

В разделе (2.1) описывается математическая модель течений идеальных реагирующих смесей. Модель основана на уравнениях Эйлера. Для всех расчётов разработана оригинальная программа, написанная на языке С. В ней используется система распараллеливания OpenMP с соответствующими библиотеками работы с нитями исполнения. Детали реализации численного алгоритма представлены в Приложении А к диссертации.

Проведено тестирование кинетических механизмов по временам задержек воспламенения:

1. Механизм З. Хонга [З. Хонг, 2010].
2. Механизм группы А.М. Терезы [А.М. Тереза и др., 2019], подсистема горения водорода.
3. Механизм GRI Mech 3.0 [Смит Г.П. и др., 1998], подсистема горения водорода.
4. Механизм У. Мааса [У. Маас, С.В. Поуп, 1992], подсистема горения водорода.
5. Механизм Ли–Джао–Казаков–Драер [Дж. Ли и др., 2004].
6. Механизм Ф. Вильямса [Ф. Вильямс, 2004].

Таблицы данных кинетических механизмов представлены в Приложении А к диссертации.

Получено, что наблюдается значительный разброс расчётных значений задержки воспламенения для ряда кинетических механизмов. Наиболее выраженная немонотонность выявлена для механизмов GRI Mech 3.0 и У. Мааса: с ростом давления (или температуры) задержка воспламенения сначала плавно уменьшается, однако при достижении некоторого критического значения происходит её резкое увеличение, после чего при дальнейшем повышении параметра она вновь начинает снижаться. Представлена методика расчёта параметров детонационной волны Чепмена – Жуге и пика Неймана.

В разделе (2.2) представлена постановка задачи о детонации в плоском канале (см. рисунок 1). Канал рассматривается как плоская прямоугольная область. Предполагается, что в этой области находится неподвижная водородно-воздушная смесь, давление и температура которой в начальном состоянии обозначаются через P_0 и T_0 , соответственно. На границах области: на горизонтальных стенках ставятся условия периодичности, на вертикальных — свободный выход. В начальном состоянии область заполнена газовой смесью, у которой заданы давление $P_0 = 1$ атм, температура $T_0 = 400$ К и отношение молярных плотностей (ненормированные молярные доли C_k) $[H_2]:[O_2]:[N_2]$.



Рисунок 1 — Схема постановки задачи о ячеистой детонации в канале.

В разделе (2.3) представлены результаты численного исследования влияния начальной температуры смеси и пространственной неоднородности подвода энергии. Проведено сравнение с экспериментальными данными, и получено хорошее совпадение размера ячейки для высоких температур. Установлено, что пространственная неоднородность подвода энергии не влияет на процесс формирования ячеистой детонации. Пример задания неоднородности представлен в Приложении А к диссертации. Представлены результаты, которые позволили установить, что наиболее подходящим кинетическим механизмом для моделирования ячеистой структуры, при сравнении с экспериментальными данными, является кинетический механизм А.М. Терезы с соавторами. Соответствующие данные представлены в таблице 1, а на рисунке 2 представлена картина ячеистых структур для различных кинетических механизмов, характеризующих распределение максимальных давлений в канале к концу расчёта. Установлен характер влияния ширины канала на формирование ячеистой детонации.

В разделе (2.4) кратко представлены выводы ко второй главе.

Третья глава посвящена исследованию химического ингибирования детонации в водородно-воздушных смесях. В работе проанализирован базовый физико-химический принцип ингибирования, изучено влияние начальной температуры смеси на устойчивость детонационной волны к действию ингибитора, а также зависимость эффективности подавления от условий формирования и стадии развития детонационного фронта.

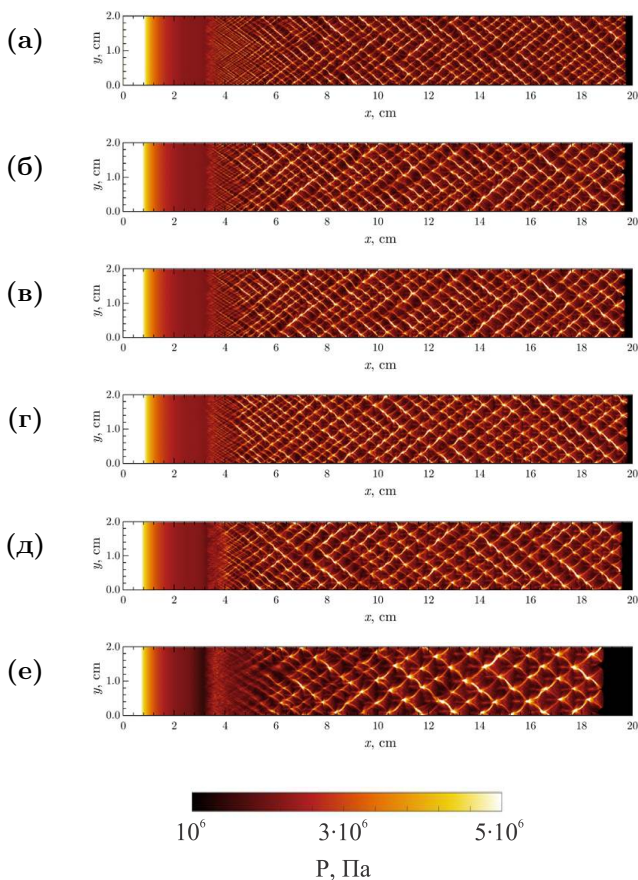


Рисунок 2 — Сравнение распределений максимальных значений давления в точках канала, полученных к моменту окончания расчёта для различных кинетических механизмов стехиометрической смеси водорода и воздуха: (а) GRI Mech 3.0; (б) У. Мааса; (в) Ли-Джао-Казаков-Драер; (г) Ф. Вильямса; (д) З. Хонга; (е) группы А.М. Терезы.

В разделе (3.1) представлены основные принципы химического ингибирования.

В разделе (3.2) представлена математическая модель, описывающая реагирующие течения смесей многокомпонентной газовой динамики с учётом химических превращений, вязкости, теплопроводности и диффузии.

В разделе (3.3) представлена постановка задачи для описания реагирующих смесей в присутствии ингибитора в плоском канале, проведено

Таблица 1 — Сравнение расчётных и экспериментальных значений размера детонационных ячеек.

Кинетический механизм	Размер детонационной ячейки (см)
Механизм У. Мааса (1992)	0.31
Механизм GRI Mech 3.0 (1999)	0.33
Механизм Ли–Джао–Казаков–Драер (2004)	0.36
Механизм Ф. Вильямса (2004)	0.40
Механизм Э. Хонга (2010)	0.44
Механизм группы А.М. Терезы (2019)	0.67
Аппроксимация экспериментальных данных С. Дорофеева (2000)	0.63

исследование учёта явлений переноса для моделирования задач разрешения ячеистой детонации.

В разделе (3.4) представлено численное исследование задачи ингибирования детонации в стехиометрической смеси водорода с воздухом. Проведено исследование влияния температуры на процесс ингибирования. Рассматривалось влияние условий формирования детонации на процесс ингибирования. Определены концентрационные пределы детонации в ингибированной смеси с использованием расширенного и сокращённого кинетических механизмов. Установлены количественные закономерности влияния углеводородной добавки на динамику и структуру детонационной волны. Проведено сравнение с экспериментальными данными (рис. 3). Проведённое сравнение кинетических механизмов позволило оценить адекватность сокращённых моделей для инженерных расчётов взрывобезопасности объектов водородной энергетики.

В разделе (3.5) кратко представлены выводы к третьей главе.

Четвёртая глава посвящена постановке и численному решению трёхмерной нестационарной задачи об иницировании, формировании и устойчивости вращающейся детонационной волны в трёхмерном канале. Значительная часть исследования посвящена анализу эффективности систем стабилизации детонации.

В разделе (4.1) представлена математическая модель для описания течения многокомпонентной газовой смеси. Математическая модель состоит из системы дифференциальных уравнений массы, импульса и баланса энергии, модели турбулентности, алгебраических соотношений и уравнения состояния, начальных и граничных условий.

В разделе (4.2) представлена постановка задачи о вращающейся детонационной волне в трёхмерном канале. Рассматривается трёхмерная область течения в форме канала между двумя непроницаемыми внешним и внутренним коаксиальными цилиндрами конечной длины (рис. 4). Внешний цилиндр имеет постоянный радиус, а внутренний состоит из цилиндра

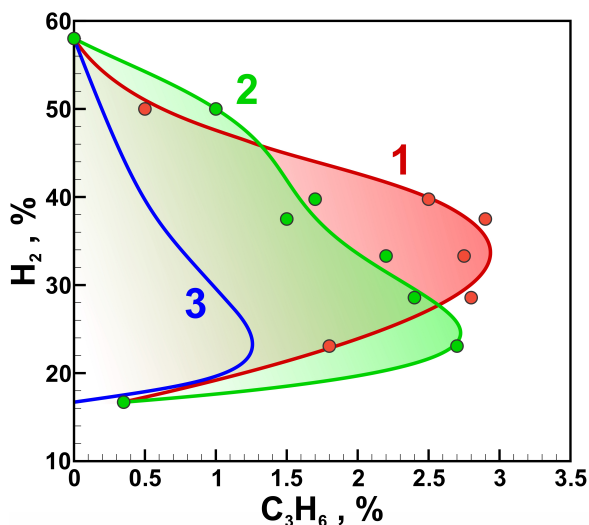


Рисунок 3 — Полуостров распространения детонации для водородно-воздушных смесей при начальной температуре 400 К и давлении 0.1 МПа. Сплошная кривая 1 — критические концентрации ингибитора для подавления детонации, полученные при численном моделировании с использованием сокращённого кинетического механизма (13 компонент, 32 реакции); сплошная кривая 2 — критические концентрации ингибитора для подавления детонации, полученные при численном моделировании с использованием расширенного кинетического механизма (58 компонент, 404 реакции); кривая 3 — экспериментальные данные.

постоянного радиуса и сопряжённого с ним конуса. Слева зазор закрыт плоским кольцом с отверстиями (форсунками), снабжёнными клапанами, которые предназначены для управления поступлением в зазор горючей смеси, называемой далее основной системой впрыска. Кроме того, аналогичные форсунки имеются на внешнем и внутреннем цилиндре у левого конца зазора. Таким образом, имеется возможность реализовать различные сценарии поступления в зазор горючей смеси. Представлена модель инициирования вращающейся волны детонации с заданным направлением.

В разделе (4.3) представлена верификация программного кода. В разделе (4.4) исследовано влияние избытка и недостатка окислителя на детонацию в смеси водорода с кислородом. В данном разделе представлены результаты исследования вращающейся детонации в бедной смеси (молярное отношение $[H_2]:[O_2] = 1:1$), стехиометрической смеси ($[H_2]:[O_2] = 2:1$) и богатой смеси ($[H_2]:[O_2] = 3:1$) водорода с кислородом при следующих параметрах расчётной области: длина внешнего цилиндра 10 см,

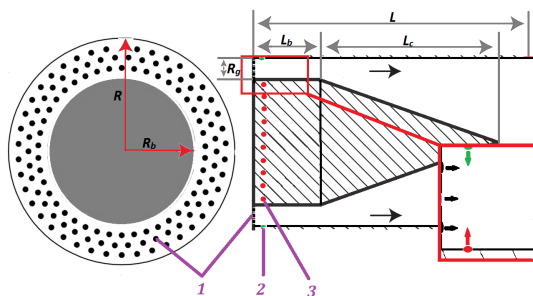


Рисунок 4 — Схема, иллюстрирующая постановку задачи: две проекции области течения, совпадающие с расчётной областью, 1 — основная система впрыска, 2 — форсунки на внешнем цилиндре, 3 — форсунки на внутреннем цилиндре. L — длина канала, L_c — высота конуса внутреннего тела, L_b — высота цилиндра внутреннего тела, R — радиус канала, R_b — радиус внутреннего тела, R_g — ширина кольцевого канала.

диаметр 5 см, длина внутреннего цилиндра 10 см, его диаметр 3 см. Количество отверстий в основной системе впрыска 72, радиус отверстия 1.5 мм. Количество отверстий на внешнем цилиндре 28, на внутреннем — 24, их радиус 2 мм. Горючая смесь подавалась из основной системы (рисунок 4(1)) с давлением торможения 15 бар и температурой 258 К и из форсунок на внешнем и внутреннем цилиндре в поперечном направлении с давлением торможения 10 бар и температурой 258 К (рисунок 4(2,3)). В начальном состоянии в канале — воздух ($[O_2]:[N_2] = 1:4$) с давлением 1 бар и температурой 300 К. На рисунке 5 показано поле давления для случаев подачи бедной, стехиометрической и богатой смесей. На рисунке 6б показано давление в виртуальном датчике (расположение как на рисунке 6а) для трёх вариантов подачи смеси.

В разделе (4.5) представлен вариант стабилизации детонационной волны за счёт дополнительной боковой подачи кислорода. Для стабилизации детонационной волны использовался метод подачи дополнительного кислорода из вспомогательной системы впрыска, расположенной на внешнем и внутреннем цилиндре (рисунок 4(2,3)). Из основной системы впрыска подавалась богатая, стехиометрическая или бедная смесь водорода с кислородом. На рисунке 7 показано поле давления для случаев подачи бедной, стехиометрической и богатой смесей с дополнительной подачей кислорода из боковых форсунок.

В разделе (4.6) исследовалось влияние состава смеси на характеристики горения в канале длиной 20 см. Представлены результаты исследования детонации в трёх смесях: бедная, стехиометрическая и богатая смеси, которые подавались через основную систему впрыска с давлением торможения 15 бар и температурой 258 К, а дополнительный

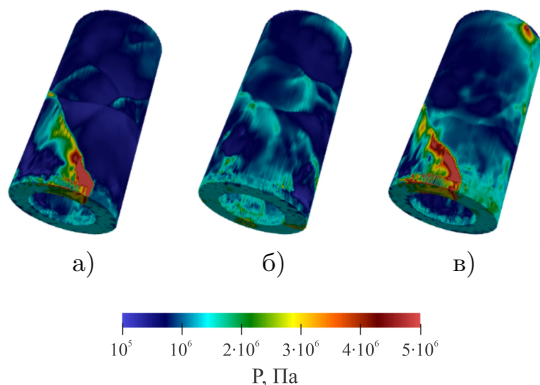
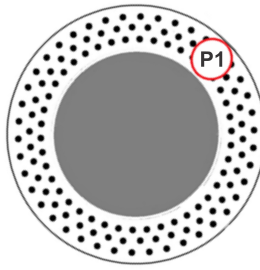


Рисунок 5 — Поле давления в момент времени 150 мкс для случаев подачи смеси в соотношении: а) $[\text{H}_2]:[\text{O}_2] = 1:1$ (бедная смесь), б) $[\text{H}_2]:[\text{O}_2] = 2:1$ (стехиометрическая смесь), в) $[\text{H}_2]:[\text{O}_2] = 3:1$ (богатая смесь).

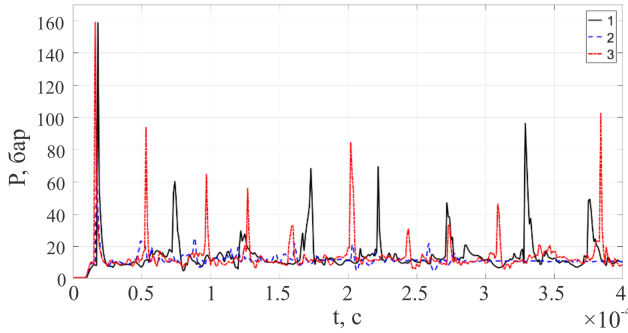
кислород или воздух поступал из вспомогательной системы через форсунки на внутренней и внешней стенках канала. Длина канала составляла $L = 20$ см, радиус внешней стенки — $R = 5$ см, радиус внутренней стенки — $R_b = 4$ см, ширина кольцевого зазора — $R_g = 1$ см, длина внутреннего цилиндра — $L_b = 6$ см, высота конуса — $L_c = 6$ см. Количество форсунок на торце канала — $N_r = 192$, радиус каждой из них $r = 0.2$ см, а на боковых стенках: $N_{r_1} = 56$ на внутренней стенке и $N_{r_2} = 68$ на внешней; радиус каждой из них составлял $r = 0.15$ см. На рисунке 8 показано поле массовой доли водорода в момент $t = 400$ мкс, которое позволяет определить положение детонационной волны и области с несгоревшим горючим.

В разделе (4.7) показано влияние количества форсунок на режим распространения детонации в канале. В разделе (4.8) представлено влияние ширины канала на режим распространения детонации в канале. В численных расчётах использовался оригинальный сокращённый кинетический механизм горения ацетилено-кислородных смесей. В разделе (4.9) представлен данный кинетический механизм и проведено его тестирование. В разделе (4.10) исследовалось влияние внешнего давления, размеров канала и условий поступления в канал ацетилено-кислородной смеси и её состава на параметры продуктов детонации.

Достоверность полученных численных результатов подтверждается их сопоставлением с данными натурных экспериментов в разделе (4.11) (конфигурация канала представлена на рис. 9). С целью сравнения с экспериментальными данными был проведён расчёт при следующих параметрах подачи смеси (ацетилен–кислород): 5 бар и 10 бар (см. рис. 10).



(а)



(б)

Рисунок 6 — Расположение “виртуального датчика” (а). Сравнение истории давления в датчике для трёх видов смесей: бедных — 1, стехиометрических — 2 и богатых — 3(б).

В результате расчётов было получено, что большую часть времени в канале наблюдается режим с одной вращающейся волной детонации, что совпадает с экспериментальными данными. Для случая подачи 5 бар, который близок по значениям давления подаваемой смеси к эксперименту, при коэффициенте избытка горючего $\phi = 1.25$ скорость волны составила $D = 1.85$ км/с. В эксперименте было получено при $\phi = 1.2 \rightarrow 1.06$, $D = 1.46 \rightarrow 1.2$ км/с. Отличие скорости связано с тем, что в расчётном эксперименте давление торможения не уменьшалось со временем, не учитывались потери на стенках за счёт охлаждения, а также раздельная подача горючего и окислителя.

В разделе (4.12) кратко представлены выводы к четвёртой главе.

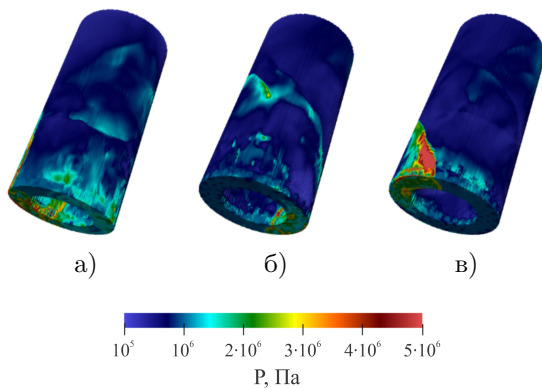


Рисунок 7 — Поле давления в момент времени 150 мкс для случаев подачи смеси в соотношении: а) $[\text{H}_2]:[\text{O}_2] = 1:1$ (бедная смесь), б) $[\text{H}_2]:[\text{O}_2] = 2:1$ (стехиометрическая смесь), в) $[\text{H}_2]:[\text{O}_2] = 3:1$ (богатая смесь) при дополнительной подаче кислорода.

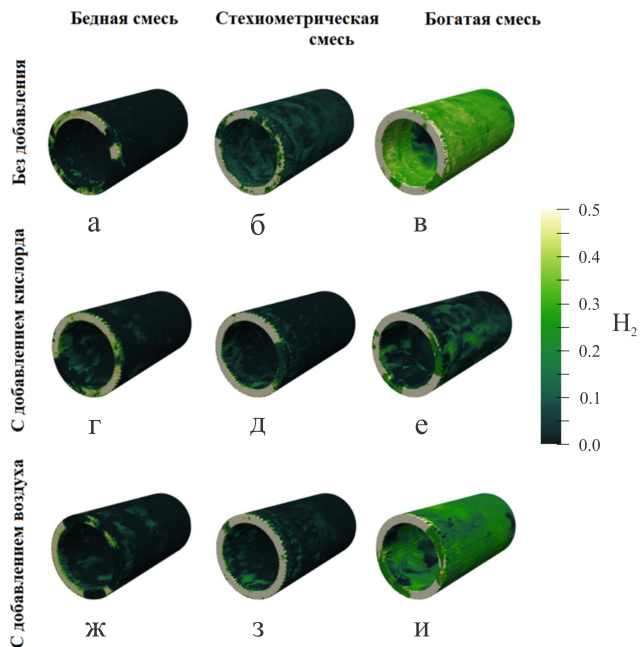


Рисунок 8 — Трёхмерное поле массовой доли водорода для всех рассмотренных случаев в момент $t = 400$ мкс.

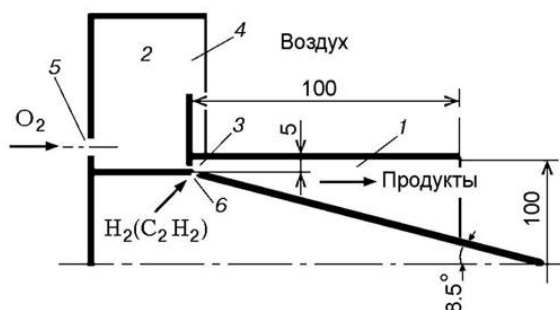


Рисунок 9 — Осевое сечение канала, исследуемого в работе Ф.А. Быковского с соавторами [Ф.А. Быковский, С.А. Ждан, Е.Ф. Ведерников, 2010]: 1 — трёхмерный канал, 2 — объём для кислорода, 3 — щель для подачи кислорода в канал, 4 — кольцевое отверстие, 5 — отверстие для подачи кислорода в объём 2, 6 — форсунка горючего.

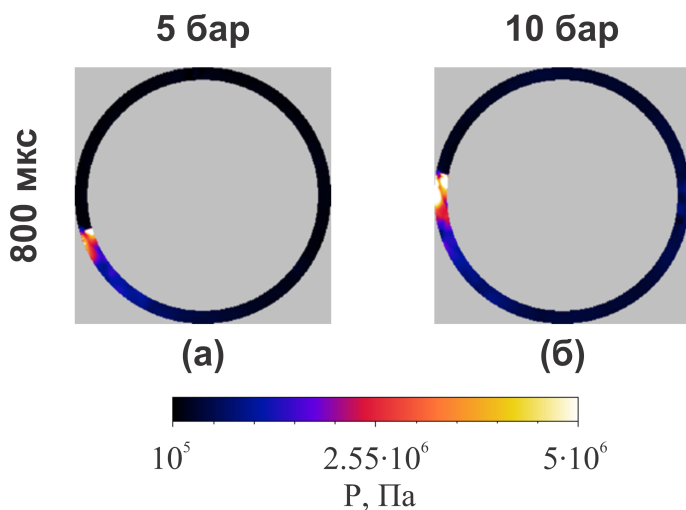


Рисунок 10 — Поле давления в плоскости Oyz в момент времени 800 мкс при подаче смеси с давлением: 1) 5 бар, 2) 10 бар.

Заключение В диссертационной работе проведено комплексное численное исследование процессов детонации в газовых смесях, включающее три взаимосвязанных направления. Первое направление посвящено численному моделированию ячеистой структуры детонационных волн в водородно-воздушных смесях. С применением оригинальной расчётной программы проведена верификация различных кинетических механизмов горения водорода. Исследовано влияние начальной температуры смеси, неоднородностей зажигания и геометрических параметров канала на формирование и стабилизацию ячеистого фронта, результаты сопоставлены с экспериментальными данными.

Второе направление посвящено изучению химических методов подавления детонации с помощью ингибиторов. Установлены количественные закономерности влияния углеводородных добавок на динамику и структуру детонационной волны в водородно-воздушных смесях. Определены концентрационные пределы детонации в смесях с ингибиторами, проведена оценка применимости сокращённых кинетических моделей для задач обеспечения взрывобезопасности водородных технологий.

Третье направление связано с исследованием возможности использования непрерывно вращающейся детонационной волны в энергоустановках. В трёхмерной нестационарной постановке проведено численное исследование течения в канале между коаксиальными цилиндрами с использованием в качестве горючего водородно-кислородных, водородно-воздушных и ацетилено-кислородных смесей. Выполнен параметрический анализ влияния геометрических характеристик канала (ширина канала, конфигурация форсунок, центральное тело) на устойчивость детонации и тяговые характеристики. Для смесей ацетилена с окислителем применён авторский сокращённый кинетический механизм, исследовано влияние внешнего давления и масштабных эффектов. Достоверность полученных результатов подтверждена сопоставлением с данными натурных экспериментов.

По итогам проведённого исследования можно сделать следующие выводы:

1. При математическом моделировании детонации от используемого механизма химической кинетики существенно зависят размеры детонационной ячейки.
2. Предложенный сокращённый кинетический механизм для горения смеси ацетилена с окислителем позволяет количественно с достаточной точностью воспроизвести основные параметры детонации и значительно ускорить проведение расчётов по сравнению с детальными кинетическими механизмами.
3. Развитая детонация может быть ингибирована процессом, изымающим из реакционной цепи атомарный водород, даже если энергетика процесса не меняется или увеличивается. Рассчитанные концентрации ингибитора,

приводящие к подавлению детонации, хорошо согласуются с данными эксперимента.

4. Затухание детонационной волны на стадии инициирования обусловлено взаимодействием со встречной волной, образовавшейся в результате подвода энергии инициирования.

5. Оптимальные тяговые характеристики для каналов достигаются при использовании в качестве топлива обеднённой и богатой горючей смесей, для которых волна детонации более устойчива и не формируются вторичные очаги детонации.

6. Боковая подача кислорода или водорода в канал может частично ослаблять встречную волну на начальном этапе инициирования и приводить к более полному сгоранию топлива. Вместе с тем она может быть источником дополнительных возмущений и приводить к возникновению условий для образования взрывов, которые способны ослабить вращающуюся детонационную волну.

7. Сравнение результатов численных расчетов процесса инициирования и распространения детонационной волны с экспериментальными данными показало качественное согласие при наличии незначительных количественных расхождений.

Публикации автора по теме диссертации

Статьи в рецензируемых журналах, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы:

1. **Mikhalchenko, E. V., Nikitin V. F., Phylippov Y. G., Stamov L. I.** Numerical Study of Rotating Detonation Onset in Engines // Shock Waves. — 2021. — Т. 31. — С. 763—776. — EDN: OUESMV Импакт фактор 1.8 (JIF)(0.875 п.л. / авторский вклад 80%: 0.7 п.л.)
2. **Смирнов Н. Н., Никитин В. Ф., Михальченко, Е. В., Стамов Л. И.** Срыв развитой детонации водородно-воздушной смеси малой добавкой углеводородного ингибитора // Физика горения и взрыва. — 2022. — Т. 58, № 5. — С. 64—71. — EDN: PVYUGW. Импакт фактор 0.867 (РИНЦ)(0.5 п.л. / авторский вклад 75%: 0.375 п.л.)
Перевод: *Smirnov, N. N., Nikitin, V. F., Mikhal'chenko, E. V., Stamov, L. I.* Detonation of a Hydrogen–Air Mixture by a Small Addition of a Hydrocarbon Inhibitor // Combustion, Explosion, and Shock Waves. — 2022. — vol. 58. — P. 564—570. — EDN: DSMHAV. Импакт фактор 1.127 (РИНЦ), 0.6(JIF).

3. *Smirnov N. N., Nikitin V. F., **Mikhailchenko, E. V.**, Stamov L. I., Tyurenkova V. V.* Modelling cellular structure of detonation waves in hydrogen-air mixtures // International Journal of Hydrogen Energy. — 2024. — Vol. 49. — P. 495–509. — EDN: DBOXNK. Импакт фактор 8.3 (JIF)(0.938 п.л. / авторский вклад 75%: 0.703 п.л.)
4. ***Михальченко, Е. В.**, Никитин В. Ф., Стамов Л. И., Филиппов Ю. Г.* Моделирование камеры сгорания двигателя с вращающейся детонационной волной // Вычислительные технологии. — 2021. — Вып. 26, № 1. — С. 33–49. — EDN: UDIXUD. Импакт фактор 0.482 (РИНЦ)(1.063 п.л. / авторский вклад 80%: 0.85 п.л.)
5. ***Mikhailchenko, E. V.*** Detonation Stability in Stratified Layers // Acta Astronautica. — 2026. — Vol. 239. — P. 713–721. — EDN: JJIKRI. Импакт фактор 3.4 (JIF)(0.563 п.л. / авторский вклад 100%: 0.563 п.л.)
6. *Nikitin V. F., **Mikhailchenko, E. V.*** Safety of a rotating detonation engine fed by acetylene – oxygen mixture launching stage // Acta Astronautica. — 2022. — Vol. 194. — P. 496–503. — EDN: YAJJBY. Импакт фактор 3.4 (JIF)(0.938 п.л. / авторский вклад 75%: 0.703 п.л.)
7. ***Mikhailchenko, E. V.*** Injected Fuel Burning In A Combustion Chamber // Heat Transfer Research. — 2023. — Vol. 54, no. 4. — P. 1–10. — EDN: DCOUTP. Импакт фактор 1.6 (JIF)(0.625 п.л. / авторский вклад 100%: 0.625 п.л.)
8. *Smirnov N. N., Nikitin V. F., Stamov L. I., **Mikhailchenko, E. V.**, Tyurenkova V. V.* Rotating Detonation in a Ramjet Engine Three-Dimensional Modeling // Aerospace Science and Technology. — 2018. — Vol. 81. — P. 213–224. — EDN: MARWWL. Импакт фактор 5.8 (JIF)(0.75 п.л. / авторский вклад 80%: 0.6 п.л.)