

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ “ФЕДЕРАЛЬНЫЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ СИСТЕМНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО
ЦЕНТРА “КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ”

На правах рукописи

Михальченко Елена Викторовна

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

Специальность 1.1.9 Механика жидкости, газа и плазмы

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д.ф.-м.н., проф. Н. Н. Смирнов

Москва — 2026

Оглавление

	Стр.
Введение	5
Глава 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ	15
1.1 Краткая история исследования детонации в газовых смесях .	15
1.2 Ячеистая структура детонационной волны	19
1.3 Ингибирование детонации	27
1.4 Непрерывно вращающаяся детонационная волна	30
Глава 2. ИССЛЕДОВАНИЕ ЯЧЕИСТОЙ СТРУКТУРЫ ДЕТОНАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛИЧНЫХ КИНЕТИЧЕСКИХ МЕХАНИЗМОВ	32
2.1 Математическая модель	32
2.1.1 Система дифференциальных уравнений смеси идеальных газов	32
2.1.2 Термодинамические соотношения и модели кинетики горения	34
2.1.3 Тестирование кинетических механизмов	37
2.1.4 Расчет параметров детонационной волны Чепмена - Жуге и пика Неймана	42
2.2 Постановка задачи о детонации в плоском канале	44
2.3 Результаты численного исследования	47
2.3.1 Влияние начальной температуры смеси на ячеистую структуру	47
2.3.2 Сравнение с экспериментальными данными по размеру детонационной ячейки	58
2.3.3 Влияние пространственной неоднородности теплоподвода на параметры детонации	61
2.3.4 Результаты численного исследования с периодическим граничным условием	66
2.4 Выводы к первой главе	71

Глава 3. ВЛИЯНИЕ УГЛЕВОДОРОДНОГО ИНГИБИТОРА НА РАЗВИТУЮ ДЕТОНАЦИЮ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ	73
3.1 Химический механизм воздействия ингибитора на детонацию	74
3.2 Математическое моделирование процесса ингибирования детонации	75
3.3 Постановка задачи о детонации в плоском канале	80
3.4 Численное исследование задачи ингибирования детонации в стехиометрической смеси водорода с воздухом	82
3.4.1 Влияние начальной температуры на ингибирование детонации	86
3.4.2 Влияние условий формирования детонации на процесс ингибирования	88
3.4.3 Определение пределов детонации при ингибировании водородо-воздушной смеси с использованием расширенного и сокращенного кинетического механизма	100
3.4.4 Сравнение с экспериментальными данными	122
3.5 Выводы ко второй главе	124
Глава 4. ИССЛЕДОВАНИЕ ТРЕХМЕРНОГО КАНАЛА С НЕПРЕРЫВНОЙ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНОЙ НА СМЕСЯХ ВОДОРОД – КИСЛОРОД И АЦЕТИЛЕН – КИСЛОРОД	127
4.1 Математическая модель	127
4.2 Постановка задачи	132
4.3 Верификация программного кода	134
4.4 Влияние на детонацию избытка и недостатка окислителя в смеси водорода с кислородом	136
4.5 Стабилизация детонационной волны. Непрерывный режим . .	144
4.6 Влияние состава смеси на характеристики горения в канале длиной 20 см	146
4.6.1 Бедная смесь	147
4.6.2 Стехиометрическая смесь	151
4.6.3 Богатая смесь	153

4.7	Влияние количества форсунок	166
4.8	Зависимость от размеров внутреннего цилиндра	167
4.9	Углеводородные смеси. Сокращенный кинетический механизм ацетилена	170
4.10	Влияние внешнего давления	174
4.11	Сравнение с экспериментальными данными	179
4.12	Выводы к третьей главе	182
Заключение		185
Приложение А.		209
A.1	Численная схема	209
A.2	Расчет химических процессов	210
A.3	Вычисление интенсивности производства компонентов	212
A.4	Коэффициент прямой реакции	215
A.5	Таблица термодинамических данных	217
A.6	Кинетические механизмы	217
A.7	Конфигурация источников возмущения детонации	227

Введение

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. Исследования ячеистой структуры детонационных волн составляют фундамент современной газовой детонации. Экспериментально неустойчивость детонационных волн была обнаружена с использованием системы регистрации перепада давления (сажемасленное покрытие на фольге) [1; 2] и с помощью оптических визуализаций [3]. Дальнейшие экспериментальные и теоретические исследования [4–16] детализировали типы волн, структуру зоны реакции и влияние состава смеси. В [9; 10] предложена замкнутая теоретическая модель детонационной ячейки. С 1980-х годов активно развивается численное моделирование [14; 17–26], позволяющее воспроизвести ячеистую структуру. Исследования [15; 27–34] направлены на верификацию кинетических механизмов. Также интерес представляют работы по использованию нейросетей для подобных задач, например нейросетевой анализ для оценки размера ячейки детонации [35]. Исследовались “вторичные” ячейки [21] и режимы на пределе распространения детонации [36–38]. Изучалось влияние на распространение детонационной волны геометрии канала [36; 39–41], пористых стенок [42], капилляров [43] и зон, заполненных инертным газом [44]. Экспериментально подтверждено влияние добавок, химически активных ингибиторов и антипиренов [45–49]. Экспериментально определены пределы детонации в смесях водород-воздух с малыми добавками ингибитора [50]. Несмотря на значительный прогресс, сохраняются пробелы, такие как воспроизводимость ячеистой структуры с использованием разных кинетических механизмов, численное подтверждение чувствительности процесса к ингибирующим добавкам.

Ранние экспериментальные и теоретические исследования вращающейся детонации относятся к 1950–1960-м годам [51–56]. Серия экспериментальных и теоретических исследований описана в работах [57–76]. В качестве топлив исследовались безуглеродные смеси (аммиак + водород) [59], обеднённые водородно-воздушные смеси [60], керосин [58; 62–64; 77]. Численное моделирование проводилось в работах [78–80]. 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 учетом имеющихся современных экспериментальных данных и данных по кинетики 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 ацетилена 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 ацетилена 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 ацетилена 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 установлены количественные закономерности 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 [81]. Выбор направления интерполяции и непосредственно расчёт конвективных членов выполнялся с помощью метода AUSM+ (Advection Upstream Splitting Method) [82], 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 [83; 84], 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 [64; 85].

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 “Горение 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) (Самапа, 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 патент и 1 программа для ЭВМ.

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:

- I. *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.
- II. *Smirnov N. N., Nikitin V. F., Mikhhalchenko, 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.
- III. *Mikhhalchenko, 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.
- IV. *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.
- V. *Mikhhalchenko, E. V.* Detonation Stability in Stratified Layers // Acta Astronautica. — 2026. — Vol. 239. — P. 713—721.
- VI. *Mikhhalchenko, E. V.* Injected Fuel Burning In A Combustion Chamber // Heat Transfer Research. — 2023. — Vol. 54, no. 4. — P. 1—10.

- VII. *Smirnov N. N., Nikitin V. F., Stamov L. I., Mikhhalchenko, E. V., Tyurenkova V. V.* Rotating Detonation in a Ramjet Engine Three-Dimensional Modeling // Aerospace Science and Technology. — 2018. — Vol. 81. — P. 213—224.
- VIII. *Nikitin V. F., Mikhhalchenko, E. V.* Safety of a rotating detonation engine fed by acetylene – oxygen mixture launching stage // Acta Astronautica. — 2022. — Vol. 194. — P. 496—503.

Зарегистрированные патенты

- IX. *Заявка 2020134379 Рос. федерация, МПК⁷ F 23 C 99/00.* Способ организации процесса сгорания в камере воздушно-реактивного двигателя / Н. Н. Смирнов, В. В. Азатын, В. Ф. Никитин, Л. И. Стамов, **Е. В. Михальченко**, В. В. Тюренкова, Е. И. Скрылева, М. Н. Смирнова, Д. А. Пестов, А. А. Шамина (Российская Федерация) ; ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН (RU). — № 2807130 ; заявл. 09.11.2023 ; опубл. 28.12.2022, Бюл. № 31, 2022134936 (Рос. Федерация).

Зарегистрированные программы для ЭВМ

- X. *Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ.* Программа для моделирования влияния ингибитора на структуру детонационной волны в водородно-воздушных смесях / Н. Н. Смирнов, **Е. В. Михальченко**, Е. И. Скрылева, Л. И. Стамов, В. В. Тюренкова ; 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).

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и 1 приложения. Полный объем диссертации составляет 227 страниц, включая 135 рисунков и 14 таблиц. Список литературы содержит 222 наименования.

Глава 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

1.1 Краткая история исследования детонации в газовых смесях

Известно, что горение газовых смесей может происходить в двух различных режимах. Дозвуковые режимы горения обобщаются под понятием дефлаграции. В случае послойного горения зона химической реакции локализована в узком слое, именуемом фронтом пламени. Пламенем называют область горения, испускающую видимый свет. Скорость распространения фронта пламени относительно исходной горючей среды является дозвуковой и, как правило, не превышает нескольких десятков метров в секунду. При медленном горении реакция окисления протекает в пламени, скорость распространения которого зависит от процессов теплопередачи и диффузии.

В случае детонации инициирование реакции происходит за счёт сжатия и нагрева смеси мощной ударной волной. При этом зона горения сосредоточена непосредственно за фронтом ударной волны, поэтому скорость распространения процесса соответствует скорости ударной волны и может измеряться километрами в секунду. Детонационное горение отличается исключительно высокой скоростью распространения фронта реакции, которая на два–три порядка превышает скорость дефлаграционных процессов.

В одних источниках утверждается, что термин “детонация” впервые был использован в его современном значении британским химиком Ф. Абелем [86; 87], которым были получены первые достоверные данные о скорости детонации пироксилина в ходе экспериментов 1869 года. В других источниках указано, что впервые термин “детонация” встречается в работах французских учёных (Е. Малляр с А.Л. Ле Шателье и М. Бертло с П. Вьелем), которые обратили внимание, что в некоторых случаях газы горят особым образом — со сверхзвуковой скоростью около 2–3 километров в секунду. Это явление, которое сначала называли “фальшивым горением” (от французского “détonner” – фальшивить, звучать не в тон) [88; 89].

Фундаментальная теория, позволяющая рассчитывать скорость детонационной волны в конкретных взрывчатых системах, была разработана В.А. Михельсоном (1893) [90] и Д.Л. Чепменом (1899), Э. Жуге (1905) [91; 92] вскоре после открытия явления детонации. Эта теория легла в основу гидродинамического подхода к описанию детонационных процессов. Её математический аппарат опирался на более ранние работы У. Рэнкина (1870) [93] и П.-А. Гюгонио (1887, 1889) [94], исследовавших законы сохранения на разрывах в ударных волнах.

Критерий Чепмена основан на выборе решения с минимальной скоростью детонации. Его аргументация сводилась к тому, что эксперименты для каждой конкретной взрывчатой смеси фиксируют единственную наблюдаемую скорость детонации, а значит, минимально возможная скорость в рамках теории должна соответствовать реальному процессу. Жуге подошёл к проблеме иначе, анализируя термодинамические состояния вдоль кривой Гюгонио для различных скоростей детонации. Он определил изменение энтропии вдоль кривой Гюгонио и обнаружил минимум. Далее он отметил, что решение с минимальной энтропией соответствует звуковому состоянию после взрыва. На этом основании Жуге предположил, что физически реализуемым решением должно быть именно звуковое (с минимальной энтропией). Позже Дж. Круссард [95] доказал, что решение с минимальной скоростью (по Чепмену) и решение с минимальной энтропией (по Жуге) эквивалентны и оба приводят к звуковому потоку за фронтом детонационной волны. Таким образом, оба исследователя независимо предложили критерий выбора скорости детонации — либо через минимум скорости, либо через минимум энтропии, — что впоследствии легло в основу теории Чепмена–Жуге (СЖ). Однако ни Чепмен, ни Жуге не дали строгого физического или математического обоснования своих постулатов, оставив этот вопрос для последующих исследований.

Интересно отметить, что В.А. Михельсон в России ранее разработал аналогичную теорию детонации. Он также проанализировал уравнения сохранения при детонации и обнаружил существование двух возможных устойчивых решений, которые сходятся к единственному решению, когда скорость детонации минимальна. К сожалению, его докторская диссертация, в которой были представлены результаты его анализа, не была известна за пределами России. Хотя эти три исследователя независимо друг от друга

сформулировали газодинамическую теорию детонации примерно в одно и то же время, с этой теорией связаны только имена Чепмена и Жуге [96—99].

Накопление экспериментальных данных, противоречащих классической теории, потребовало углублённого изучения структуры фронта детонационной волны и механизмов её распространения. В 1940 году Я.Б. Зельдович разработал физическую модель детонационного фронта, установив взаимосвязь между условиями протекания реакции и принципом минимума скорости детонации, ранее постулируемым в теории Чепмена–Жуге. Это исследование ознаменовало переходный этап в изучении детонации, одновременно завершив развитие гидродинамической теории и подтвердив справедливость гипотез Чепмена и Жуге.

Примечательно, что аналогичные работы появились практически одновременно в разных странах: Я.Б. Зельдович (1940) [100—102], Дж. фон Нейман (1942) [103], Г. Дёринг (1943) [104] (ЗНД-теория). Особое значение имеют также работы Анатолия Андреевича Гриба. В своей диссертации А.А. Гриб (1939 год) доказал, что плоская детонационная волна обязательно должна распространяться в режиме Чепмена–Жуге с соответствующей этому режиму скоростью [105]. Это фундаментальное положение стало важным вкладом в теорию детонации, подтвердив необходимость существования определённого равновесного состояния при распространении ударных волн в реагирующих средах. Ключевое положение теории ЗНД — существование зоны повышенного давления в детонационном фронте — впоследствии получило экспериментальное подтверждение как для газообразных, так и для конденсированных взрывчатых веществ (рисунок 1.1).

Теория детонации ЗНД предполагает, что сжатие топливной смеси происходит мгновенно во фронте ударной волны (**D** на рисунке 1.1). Это резкое сжатие приводит к воспламенению смеси в зоне индукции (область **W** на рисунке 1.1), протяжённость которой определяется характерным временем образования свободных радикалов и скоростью распространения ударной волны. После воспламенения начинается зона активного горения, где смесь полностью преобразуется в продукты сгорания, причём длина этой зоны зависит от скорости реакции окисления, которая, в свою очередь, определяется давлением и температурой за фронтом ударной волны. Замечательно, что протяжённость зоны химических реакций за ударной волной совершенно не зависит от геометрических размеров устройства, в ко-

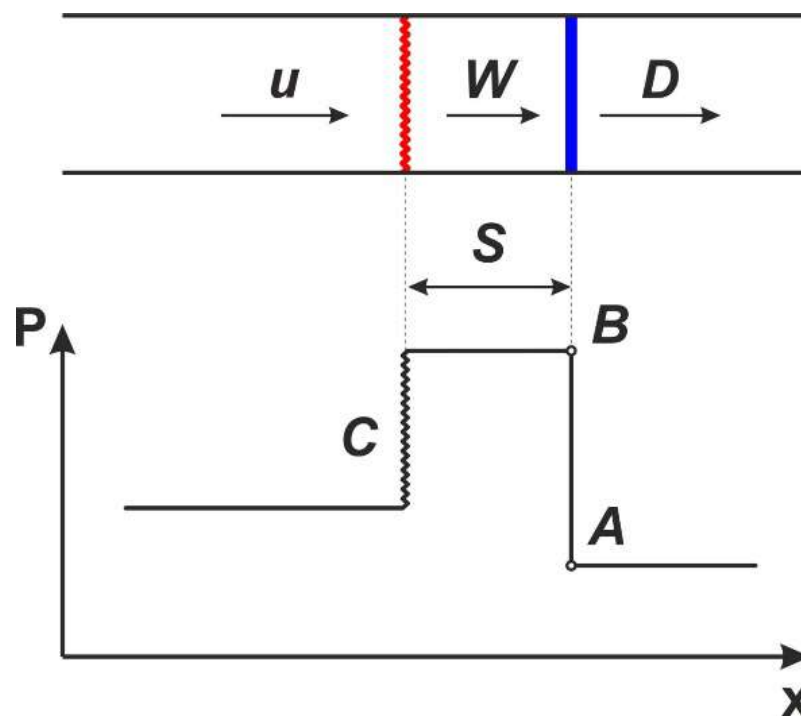


Рисунок 1.1 — Модель детонации Зельдовича–Неймана–Дёринга (ЗНД). **D** — детонационная волна, **W** — зона индукции, **u** — продукты сгорания, **A–B** — газодинамический разрыв, **s** — зона образования свободных радикалов, **C** — волна разрежения, в которой происходят химические реакции окисления.

тором возникает детонация, поэтому часто её можно считать равной нулю. Таким образом, ударная волна и бесконечно тонкая зона химических реакций образуют единую детонационную волну — газодинамический разрыв, на котором происходит и скачкообразное увеличение давления, плотности, температуры, и химические реакции превращения топливной смеси в продукты сгорания.

Эта модель, несмотря на своё упрощение (идеализация бесконечно тонкой зоны реакций), хорошо описывает основные особенности детонационных процессов в газах и конденсированных средах, что подтверждается многочисленными экспериментальными данными. При этом в реальных системах толщина зоны реакций хотя и мала, но конечна, и её учёт становится важным при рассмотрении тонких эффектов детонации.

Теоретический анализ устойчивости модели ЗНД, выполненный Д. Эрпенбеком [106; 107], показал, что детонационная структура этой модели неустойчива к бесконечно малым продольным возмущениям. Эти результаты были численно подтверждены В. Фикеттом и В. Вудом [108] в их

исследовании эволюции одномерной детонационной волны, возбуждаемой движением поршня. Оба исследования выявили, что для фиксированной степени пересжатия детонационной волны существует критическое значение энергии активации: при значениях ниже этого порога детонация остаётся стабильной, тогда как его превышение приводит к развитию неустойчивости. При этом увеличение степени пересжатия, напротив, способствует стабилизации детонационной волны.

С 1960-х годов в научной практике активно используется метод вычислительного моделирования, который стал широко применяться не только в области горения и детонации, но и во многих других дисциплинах. Математическое моделирование стало мощным дополнением к натурным экспериментам, поскольку позволило с минимальными затратами проводить множественные однотипные расчёты и свободно варьировать ключевые параметры системы независимо друг от друга, что в условиях физического эксперимента часто затруднительно или невозможно. Ярким примером эффективности этого подхода является двухстадийная кинетическая модель тепловыделения в детонационной волне, разработанная В.П. Коробейниковым и В.А. Левиным [109—112]. В отличие от классической модели ЗНД, их подход, основанный на системе уравнений Эйлера и двух модельных уравнениях химической кинетики, позволил с высокой точностью описать сложную нелинейную структуру зоны химической реакции за фронтом детонационной волны. Первое уравнение в этой модели описывает задержку воспламенения, а второе — непосредственно процесс выделения тепла.

Хотя явление газовой детонации изучается уже более века — с пионерских работ Чепмена (1899), Жуге (1905), Михельсона (1893), природа многомерных детонационных структур в реагирующих газовых смесях остаётся не до конца изученной.

1.2 Ячеистая структура детонационной волны

Важной характеристикой детонационного горения является детонационная ячейка. Детонационные ячейки представляют собой ромбовидные

структуры, которые наблюдаются при прохождении детонационной волны по каналу со стенками, покрытыми маслом с включением частиц, например таких как сажа. Фронт детонации, движущийся вдоль канала, не плоский, и на нем имеется множество перемещающихся по нему изломов в местах пересечения (в тройных точках) фронта с поперечными волнами, находящимися за ним и взаимодействующими друг с другом и со стенками канала. Эти тройные точки, двигаясь вдоль стенок канала, удаляют сажу, оставляя следы, который образуют сетку с ромбовидными ячейками, которые называют детонационными ячейками. Детонационная ячейка является одним из наиболее интересных особенностей детонационных течений. Численное и экспериментальное изучение этого явления позволяет получить представление о возможности управления переходными и детонационными режимами. Изучение ячеистой структуры важно в связи с развитием новых технологий в химической промышленности (микрореакторы) и энергетике (миниатюрные энергетические источники) и с точки зрения информации о детонационных течениях в целом, например, для калибровки программных комплексов, разрешающих детонационные течения. Исследования структуры фронта детонации в топливных системах на основе водорода или углеводородов, важны для практических приложений в области анализа взрывоопасности. Масштабы детонации и характер неустойчивости можно контролировать, регулируя химический состав смеси и начальные условия.

При детонации связь между гидродинамикой и выделением химической энергии имеет решающее значение. Скорость реакции за фронтом ударной волны чувствительна к температурным возмущениям, и, как следствие, детонационные волны в газах всегда нестабильны.

Экспериментально неустойчивость детонационных волн в газах была обнаружена с использованием системы регистрации перепада давления [1; 2] и с помощью оптических визуализаций [3]. Когда детонация проходит по поверхности, в саже остается размытый узор. Ячеистая картина является проявлением нестабильности фронта и возникает на масштабах длины порядка 1 – 300 мм для смесей газообразное топливо – кислород – разбавитель. Смеси, сильно разбавленные, например аргоном, имеют регулярную или более организованную структуру по сравнению с неразбавленными смесями. Детонации с регулярной структурой, по-видимому, имеют макроскопическое поведение, совершенно иное, чем детонации с нерегулярной структурой

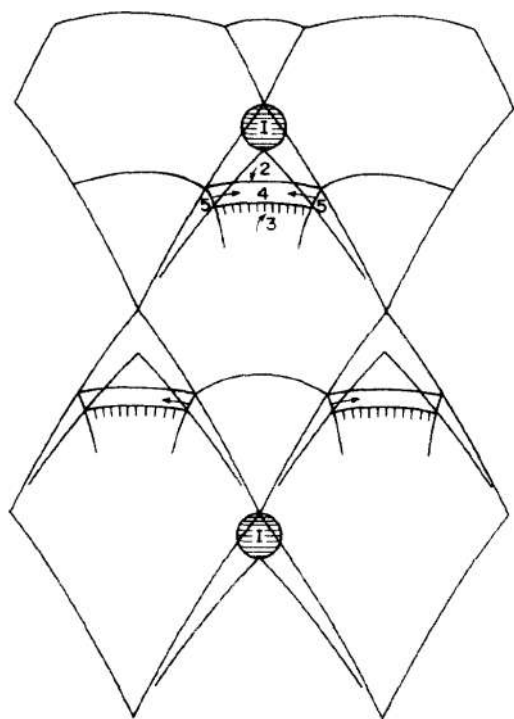
и такие параметры, как энергия инициирования, критический диаметр трубы, масштабируются по-разному.

Нестабильность фронта и появление поперечных волн наблюдались в [3] с помощью интерферометрии, а затем несколько исследователей [4; 5; 7; 8; 13; 113] визуализировали с помощью шпирен-метода. Структура неустойчивого фронта детонации схематично показана в двумерной постановке на рисунке 1.2. Ведущая ударная волна совершает периодические колебания в пространстве и во времени. Поперечные волны движутся по нормали к направлению распространения детонации; они периодически сталкиваются с волнами противоположного направления. После столкновения появляется область с высокой температурой и давлением, и локальная ведущая ударная волна ускоряется по отношению к более слабым соседним участкам. По мере продвижения фронта газ расширяется, и амплитуда скачка плавно спадает до следующего столкновения поперечных волн. Колебание фронта называется циклом (во времени) или ячейкой (в пространстве). Таким образом, в силу сильной нелинейности процесса за фронтом ударной волны формируется пространственное течение с поперечными волнами [9; 114].

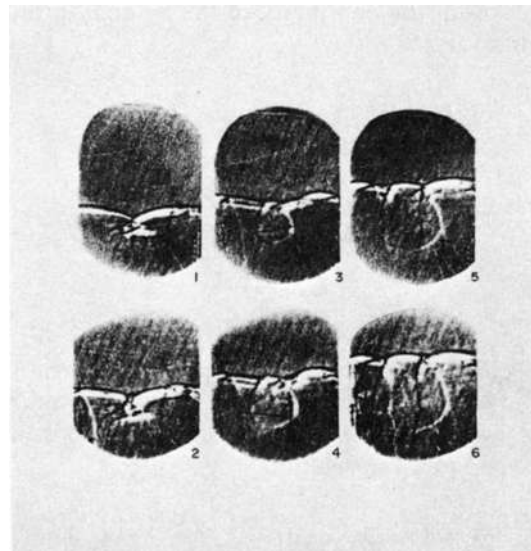
В работе [10] излагается модель элементарной детонационной ячейки. На ее основе строится геометрия ячеек и кинематика волновых фронтов, образующих ячейки. Размер ячейки определяется из предположения, что время индукции зависит от температуры по закону Аррениуса. Показано, что такие кинетические параметры смеси, такие как энергия активации, могут быть получены из размера ячейки. На рисунке 1.2а представлен схематический отпечаток детонационной волны, а на рисунке 1.2б приведены шпирен-фотографии микровзрыва. Согласно эксперименту (для цилиндрического случая), столкновение поперечных волн приводит к локальному микровзрыву с последующим нестационарным распространением взрывной волны из зоны столкновения.

Экспериментальные измерения были также выполнены в работах [11; 12; 113].

П. Уртью и А. Оппенгейм [115] показали, что треки тесно связаны с тройными точками на фронте детонации, хотя точный физический механизм образования треков в слое сажи до сих пор не ясен. Ширина ячеек, которые появляются на фольге, является мерой расстояния между поперечными волнами. Этот глобальный масштаб длины, называемый шириной



а)



б)

Рисунок 1.2 — а) Схематический отпечаток детонационной волны. б) Шлирен-фотографии микровзрыва, возникающего при столкновении поперечных волн. Рисунки взяты из исследования [10].

ячейки детонации. Ширина детонационной ячейки и длина зоны индукции приблизительно пропорциональны для широкого диапазона смесей и могут быть эмпирически связаны с динамическими параметрами, такими как критическая энергия инициирования [116], также ширина варьируется в зависимости от коэффициента избытка горючего [15]. В [117] проведено исследование двух ключевых параметров газовой детонации: критической энергии и размер ячейки. Также разрабатывались улучшенные модели реакций для точного количественного моделирования детонации.

Геометрические параметры ячеистой структуры, а именно ширина ячейки и степень регулярности рисунка, служат ключевыми характеристиками детонационной волны. Анализ этих параметров позволяет делать выводы о тонкой структуре фронта и механизме его самоподдерживающегося распространения. В работе [118] изучаются различные горючие смеси, и проводится их классификация, учитывая гидродинамическую устойчивость зоны реакции. Комплексный анализ экспериментальных данных и численных расчетов показывает, что в режимах слабонеустойчивой детонации поперечные волны не вносят существенных искажений в классическую

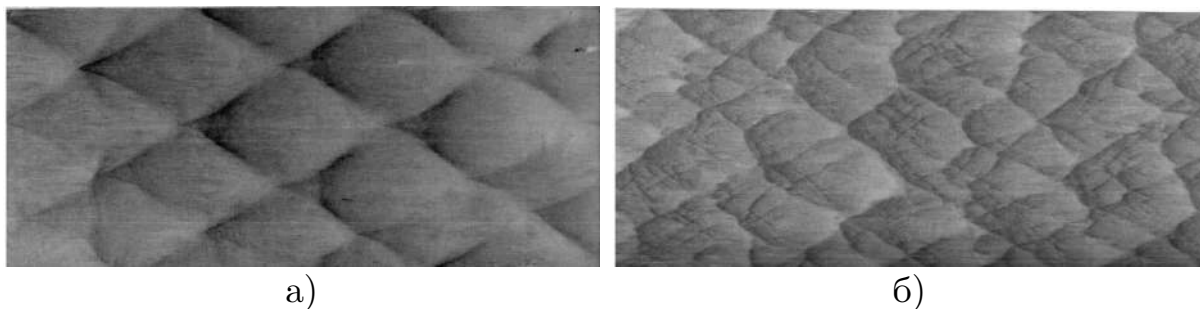


Рисунок 1.3 — а) регулярная ячеистая структура в $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 17\text{Ar}$, $P_0 = 20$ кПа; б) нерегулярная структура в $\text{C}_3\text{H}_8 + 5\text{O}_2 + 9\text{N}_2$, $P_1 = 20$ кПа. Направление распространения детонации — слева направо. Рисунки взяты из исследования [118].

структуру Зельдовича–Неймана–Дёринга. В данном случае нестабильность характеризуется единственным пространственным масштабом, а механизм энерговыделения сводится к ударно-инициированному тепловому взрыву за фронтом, который остается кусочно-гладким. Наблюдалось, что очень нестабильные детонации имеют существенно различное поведение, включая большие скачки главной ударной волны и локализованные взрывы в зоне реакции. В экспериментах было замечено, что некоторые смеси имеют легко идентифицируемую доминирующую ширину ячеек и регулярную структуру, тогда как другие смеси имеют более широкий спектр масштабов длины и более нерегулярную структуру (рисунок 1.3).

Классификация различных смесей по регулярности ячеистой структуры, наблюдаемой на закопченной фольге (сажемаслянных), была проведена в [13] и в [14] для смеси $\text{H}_2 + \text{O}_2$. В [117] установка представляет собой круглую трубу длиной 7.3 м и внутренним диаметром 28.0 см. Детонации инициируются на одном конце трубки с помощью взрывающейся проволоки и небольшого впрыска ацетилена. Возникающий взрыв или детонация проходит по трубке, вскоре образуя самоподдерживаемую детонацию в газе. Размер ячейки измеряется на цилиндрической закопченной фольге, помещенной внутри трубки на дальнем её конце.

При разбавлении аргоном более 60% результаты показали регулярную структуру детонационной ячейки. В смеси $\text{H}_2 + \text{O}_2$ с разбавлением до 50% N_2 наблюдалась нерегулярная ячеистая структура. Было также обнаружено, что добавление CO_2 не улучшает регулярность. Эти классификации основаны на субъективных наблюдениях и служат только для качествен-

ных выводов. Количественный анализ закономерностей был проведен Дж. Шепардом с соавторами [27], которые использовали пики спектральной плотности мощности, вычисленные по цифровым изображениям закопченной фольги, для определения присутствующих частот. Их результаты подтверждают классификацию, описанную Р. Стрехлоу [13] для водорода и ацетилена с разбавлением аргоном и азотом. Регулярность ячеистой структуры связана с энергией активации смеси [16], при этом смеси с более высокой энергией активации обычно имеют нерегулярную структуру. Однако Дж. Шепард с соавторами [27] обнаружили, что этот параметр не всегда коррелирует с наблюдаемыми вариациями размеров детонационной ячейки. В нескольких экспериментальных исследованиях сообщалось, что динамический отклик фронтов детонации на изменение граничных условий зависит от регулярности ячеистой структуры. При исследовании влияния регулярности ячеистой структуры на распространение детонации в небольших трубках (относительно ширины детонационной ячейки) И. Моэн и др. [119] измерили минимальную волновую скорость и вычислили дефицит скорости для разнообразных смесей. Они определили, что в обычных смесях, таких как $\text{C}_2\text{H}_2 + 2.5\text{O}_2 + 75\% \text{ Ar}$, достигается снижение скорости детонации порядка 10% относительно скорости Чепмена-Жуге, в то время как в смесях с нерегулярной структурой детонации, таких как $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{воздух}$, распространяются с минимальной скоростью, близкой к значению Чепмена-Жуге, со снижением скорости порядка 2%. М. Радулеску и Д. Ли [36], основываясь на работе [120] изучали механизм разрушения детонации в различных смесях при распространении волны вдоль пористой стенки. Они пришли к выводу, что в чистых смесях углеводородов с окислителем разрушение детонации происходит, когда затухание поперечных волн на пористой стенке преодолевает их самопроизвольную генерацию во фронте. В то же время, в смесях углеводородов с окислителем, разбавленных аргоном, где наблюдается регулярная структура детонационной волны, разрушение детонации связано с потерями массы и импульса при прохождении вблизи пористой стенки.

Экспериментальные исследования газовых детонаций и двумерное численное моделирование [14; 17–20; 121] показали, что ячеистые структуры, вызванные нестабильным фронтом детонации, могут содержать небольшие вторичные ячейки, которые появляются внутри основной ячейки

детонации. Это происходит, когда перегруженные части фронта детонации становятся достаточно неустойчивыми, чтобы образовались вторичные тройные точки за временной промежуток между двумя последовательными столкновениями конфигураций первичных тройных точек [17].

В работе [21] в плоском канале экспериментально обнаружен новый режим неустойчивой детонации вблизи пределов распространения. Режим включал три вида детонационной неустойчивости: первичную нестабильность; нестабильность перегруженных частей переднего фронта; нестабильность поперечных детонаций. Численное моделирование показало, что поперечные детонации возникают в случае большой ширины индукционной зоны за ведущей ударной волной. Полученная структура реакционной зоны была аналогична той, что наблюдалась для спиновых детонаций.

В работе [28] на основе анализа корреляции между характерной шириной зоны реакции, рассчитанной на основе подробных химических кинетических моделей, и экспериментально измеренными или численно смоделированными размерами ячеек детонации предлагается подход к обобщению такой корреляции с учетом многомерной структуры детонации.

Значительный объем исследований, посвященных изучению детонации и ее ячеистой структуры, выполнен В.А. Левиным в соавторстве с коллегами [22; 122—128].

Оценки размера детонационной ячейки проводятся и с помощью нейросетевого анализа, например в работе [35]. Целью исследования было разработать модель для предсказания размеров детонационной ячейки на основе глубокой нейронной сети в смесях водорода, метана и пропана с воздухом и кислородом. Полученные прогнозы были апробированы на экспериментальных данных, полученных в ходе исследования параметров детонации, а также с данными, доступными в литературе.

При моделировании таких сложных процессов как горение и детонация наиболее ресурсоемким является расчет химической кинетики. Для сокращения времени проведения таких расчетов часто используют редуцирование кинетических механизмов. К примеру, в работах авторов [129—131] аналитически, численно и экспериментально исследуются механизмы формирования спиральных нелинейных волновых структур в процессе распространения волны горения, с использованием сокращенного кинетического механизма.

Выбор подходящего кинетического механизма оказывает ключевое влияние на результаты исследований. Коллегами из Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова осуществлялось всестороннее исследование различных кинетических механизмов, в том числе были разработаны собственные кинетические механизмы, проведено их тестирование и сравнение их работы с другими известными кинетическими механизмами и экспериментальными данными. Проведен цикл исследований применения авторской кинетики для различных задач, связанных с процессами горения и детонации [29—33].

Детонационные структуры в узких каналах обычно имеют двумерную структуру [132]. Тем не менее, они имеют тенденцию распространяться с большим дефицитом скорости из-за потерь. Кроме того, в узких каналах увеличивается размер ячеек, предположительно из-за увеличения длины зоны реакции [133], а также сужается диапазон давлений, ниже которых детонации не могут распространяться [37; 134; 135].

Командой из работы [22] проведено также трехмерное моделирование ячеистой детонации в пропан-воздушной смеси с использованием одностадийной кинетики. Таким образом, размер детонационной ячейки может меняться во времени в ходе развития процесса распространения детонационной волны, хотя статистически можно определить некоторую среднюю величину. Эта величина физически зависит от свойств горючей смеси перед волной (давление, температура, состав), а также может зависеть от геометрии пространства, в котором распространяется детонация, и от граничных условий на боковых стенках. Помимо этого, в расчетах размер зависит от выбранной модели химических взаимодействий, не только от энергетики, но и от времени задержки химической реакции. Если расчетная энергетика смеси определяется ее составом и слабо зависит от модели химической кинетики, то расчетное время задержки, (величина, сама зависящая от давления, температуры и состава исходной смеси после первичного подъема этих значений в лидирующей ударной волне) напротив, существенно зависит от выбора кинетического механизма. Достаточно сказать, что имеются механизмы, в которых время задержки реакции для одних и тех же исходных параметров различается на порядки.

1.3 Ингибирование детонации

Детонация как физико-химический процесс может проявляться в двух принципиально различных аспектах: Негативное проявление - неконтролируемая детонация в аварийных ситуациях (например, при утечке и воспламенении топливно-воздушных смесей), приводящая к разрушительным последствиям.

Целевое применение - управляемая детонация, используемая в специальных технологических процессах, таких как разработка перспективных энергетических установок или, например, процессы детонационного напыления для создания износостойких и термобарьерных покрытий, а также другие технологии, использующие ударно-волновое воздействие.

В случае неконтролируемой детонации необходимо понимать каким образом можно на нее повлиять чтобы ее предотвратить. В случае целевого применения детонации необходимо понимать механизмы образования детонации и методы ее стабилизации.

Топливо на основе водорода считается более экологичным по сравнению с традиционными ископаемыми видами топлива. Многие фундаментальные и прикладные исследования направлены на изучение использования водорода в качестве топлива. Международное энергетическое агентство сообщило [136], что к 2050 году мировой спрос на водород составит 528 миллионов тонн, что в шесть раз больше по сравнению с 87 миллионами тонн в 2020 году. Водород обладает огромным потенциалом в качестве энергоносителя и стал многообещающей альтернативой традиционным видам ископаемого топлива. Поскольку мир сталкивается с проблемами изменения климата и энергетической безопасности, водород привлекает все большее внимание как экологически чистое и эффективное топливо.

Основные проблемы, которые необходимо решить на пути к повсеместному использованию водорода в качестве топлива, связаны с эффективным производством, безопасным хранением и транспортировкой водорода потребителям. Низкие пределы воспламеняемости водородно-воздушных смесей [137] и способность поддерживать интенсивное горение даже при близких к предельным составам смесей [138] диктуют строгие требования, связанные

с пожаро- и взрывобезопасностью при использовании водородного топлива. Неконтролируемые утечки водорода являются источником повышенной взрывоопасности в аэрокосмической отрасли, в химической промышленности и в атомной энергетике. Примерами разрушительных аварий являются в 1979 году [139], взрыв на Чернобыльской атомной электростанции в 1986 году [140] и авария на Фукусиме в 2011 году [141]. Эти инциденты продемонстрировали, что взрывы газообразного водорода в атмосфере окислителя под давлением могут иметь катастрофические последствия.

Благодаря низкой энергии воспламенения реакции горения в водородно-воздушных смесях могут начаться от разряда статического электричества. Высокая скорость распространения образующегося пламени способствует возможности последующего возникновения детонации в ограниченных объемах [142] и открытых пространствах [143] в результате так называемого процесса перехода от дефлаграции к детонации. Подавить этот процесс часто удается за счет изменения геометрии канала путем введения физических барьеров, или уменьшения его сечения до критических размеров, при которых распространение детонации становится невозможным [43], или за счет дополнительных потерь импульса или тепла [42; 144; 145]. Однако такие меры не очень надежны и требуют дорогостоящих конструктивных изменений. Введение в горючую смесь различных добавок, в частности, химически активных ингибиторов и антипиренов, считается наиболее простым и результативным подходом к контролю над процессом горения [46; 47]. В последнее время такой подход к управлению режимами горения и подавлению детонации в водородно-воздушных смесях доказал свою эффективность [39; 47—49; 146].

В водородно-воздушных смесях можно наблюдать два основных режима горения, а именно дефлаграцию и детонацию, механизм распространения которых существенно различны. Волна горения распространяется с дозвуковой скоростью за счет теплопередачи и диффузии активных радикалов в свежую смесь, тогда как детонационная волна движется со сверхзвуковой скоростью, а свежая смесь воспламеняется за счет сжатия и нагрева в ударной волне, которая является головным фронтом волны детонации. Поскольку давление и скорость газа в волне детонации могут достигать, соответственно десятков атмосфер и нескольких сотен метров в секунду, то формирование детонации в результате случайного выброса

водорода может привести к гораздо большему ущербу по сравнению с дефлаграцией [147; 148].

В работах [149; 150] было показано, что взрыв облаков паров водорода возможен даже в открытом космосе, а случайный выброс водорода в атмосферу может привести к образованию горючих облаков, склонных к детонации. В работе [45] представлены расчетные параметры горения и детонации водородно-кислородных и водородно-воздушных смесей с различными молярными долями компонентов, а также с различными начальными давлениями и температурами.

Имеются работы, в которых рассматриваются различные методы предотвращения детонации водородных топлив. Так, в работе Д. Нортон и Д. Вальоса [151] отмечено, что потери тепла на стенки и адсорбция свободных радикалов являются важными факторами, влияющими на тушение пламени. М. Радулеску и Д. Ли (2002) [36] заметили, что подавление детонации связано с устранением поперечных ударных волн и связанной с ними многомерной структуры детонации. Чжан и др. [38] также обнаружили, что нестабильность детонации связана с величиной коэффициент избытка горючего. В работе [39] показано, что геометрия канала и структура препятствий в канале влияют на распространение детонации. Задача взаимодействия пламени с препятствием и возможным переходом от режима дефлаграции к детонации рассматривались в работах [40; 41].

Химическое ингибирование детонации рассматривалось в [48], где численно исследовалась способность водородно-воздушных/кислородных смесей, разбавленных CF_3I , H_2O , CO_2 и N_2 , поддерживать стабильную детонационную волну. Химические ингибиторы продемонстрировали свою эффективность в подавлении различных режимов горения.

Химическая реакция водорода с кислородом является классическим примером разветвленной цепной реакции. В цепных реакциях важнейшую роль играют радикалы как промежуточные продукты элементарных стадий. Без посредничества радикалов конечный продукт не образуется. В реакции H_2 и O_2 наиболее подвижным и активным радикалом является атомарный водород H [50]. Если снизить скорость его образования или изъять из зоны реакции, реакция замедлится. Веществом, которое можно использовать для снижения концентрации атомарного водорода, может быть ненасыщенный углеводород. Реакция ненасыщенного углеводорода с

атомарным водородом сопровождается разрушением двойной связи между атомами углерода. Образующийся алкановый радикал гораздо менее активен, чем атомарный водород. О численном моделировании влияния данного класса ингибиторов на подавление формирования детонации впервые сообщалось в работах [146; I]. Аналогичные сценарии ингибирования наблюдались в эмульсиях масло-в-воде на основе гептана, где гептан поглощает атомарный водород и активные радикалы ОН и способствует прекращению процесса разветвления цепи [152; 153].

Ячеистая структура детонационных волн отражает режим распространения детонационной волны, ее возникновения и затухание [21; 154]. Анализ переходных режимов детонации демонстрирует роль ее ячеистой структуры [21; 28; 116; 154]. Теоретические и численные исследования показали, что ячеистая структура, в свою очередь, очень чувствительна к химической кинетике в целом [II], и к ингибирующим добавкам в частности [146; 155]. Исследования влияния зоны, заполненной инертным газом, на распространение детонационной волны рассматривалось в работе [44].

1.4 Непрерывно вращающаяся детонационная волна

В конце 1950-х — начале 1960-х годов в Институте гидродинамики Сибирского отделения Академии наук СССР в Новосибирске была впервые зарегистрирована непрерывно вращающаяся детонация (также называют непрерывно вращающейся спиновой детонацией). В работах [156; 157] Б.В. Войцеховский, по аналогии со спиновой детонацией [113; 158], описал процесс непрерывного детонационного горения. Первая успешная реализация непрерывного детонационного горения ацетилено-кислородной смеси была достигнута в плоском кольцевом канале [156; 157]. Смесь подавалась через узкий внутренний зазор, а продукты сгорания удалялись через широкий наружный. Поперечная детонационная волна распространялась перпендикулярно потоку со скоростью, близкой к скорости звука в продуктах реакции. Эти исследования в плоских кольцевых каналах продолжили В.В. Михайлов и М.Е. Топчиян [159].

Только в конце прошлого века и начале XXI века в России, Польше, Франции и Сингапуре почти одновременно возобновились интенсивные исследования вращающейся детонации [160—162].

Фундаментальные аспекты непрерывной спиновой детонации представлены в монографии авторов Ф.А. Быковского и С.А. Ждана [57]. Исследовательская группа под руководством Ф.А. Быковского и С.А. Ждана из Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН проводит пионерские работы в области непрерывного детонационного горения. Их исследования сосредоточены на экспериментальном изучении и реализации этого интенсивного режима сжигания топлива [57—66; 77; 163].

Группа под руководством академика В.А. Левина в НИИ механики МГУ имени М.В. Ломоносова в течении многих лет проводились экспериментальные и численные исследования пульсирующей и вращающейся режимов детонации [78; 79; 164—167].

Коллектив под руководством профессора С.М. Фролова в Институте химической физики им. Н.Н. Семенова РАН проводит систематические и многоплановые теоретико-экспериментальные исследования режимов детонации [67—76; 168].

Вопросы использования детонации в энергоустановках рассматривались в работах [76; 161; 169—189].

Хотя существующие работы существенно углубили понимание характеристик вращающейся детонационной волны и процессов горения по отдельности, на стыке этих знаний сохраняются критические пробелы. К ним относятся, например, поиск оптимального состава топлива, разработка эффективной и стабильной системы его подачи и др. Эти проблемы носят комплексный характер, и их необходимо решать совместно. Ситуацию усложняет высокая чувствительность системы: даже незначительное изменение конфигурации канала может привести к кардинальному изменению процессов детонации и горения [III; 190—СХСII; IX]. Аналогичные сложности возникают и при численном моделировании, где корректность результатов критически зависит от выбора адекватных математических моделей и детальных кинетических механизмов химических реакций [IV]. Таким образом решение таких задач о быстропротекающих процессах возможен только с помощью комплексного теоретико-экспериментального подхода [II; IX; V—VII; X].

Глава 2. ИССЛЕДОВАНИЕ ЯЧЕИСТОЙ СТРУКТУРЫ ДЕТОНАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛИЧНЫХ КИНЕТИЧЕСКИХ МЕХАНИЗМОВ

Глава посвящена численному исследованию в двумерной постановке ячеистой структуры детонационной волны, распространяющейся в каналах по покоящейся смеси водорода с воздухом. Основная цель - сравнение нескольких детальных кинетических механизмов горения водорода применительно к моделированию детонации и определение ключевых параметров, влияющих на её структуру. Для расчетов использовалась оригинальная компьютерная программа, которая позволила получить данные о влиянии начальной температуры смеси, неоднородности распределения энергии в зоне инициирования детонации и ширины канала на ячеистую структуру детонационной волны. Проведено сравнение с экспериментальными данными по размерам детонационной ячейки. Результаты данной главы опубликованы в статье [II].

2.1 Математическая модель

2.1.1 Система дифференциальных уравнений смеси идеальных газов

Для описания течений с волнами горения и детонации используется система уравнений многокомпонентной реагирующей газовой динамики, которая состоит из уравнений баланса массы каждого из компонента, уравнений импульса и энергии без учета эффектов переноса, но с учетом трансформации химической энергии в тепловую в процессе химреакций [I]:

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} + \operatorname{div} (X_k \mathbf{u}) = \hat{\omega}_k(X_1, \dots, X_N; T) \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) + \operatorname{grad} p = 0 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial E_T}{\partial t} + \operatorname{div}((E_T + p)\mathbf{u}) = Q \quad (2.3)$$

В этих уравнениях: t – время, $\mathbf{u}$ – вектор скорости, ρ – плотность смеси, p – давление смеси, T – температура, E_T – сумма внутренней, химической и кинетической энергии единицы объема смеси, Q – интенсивность внешнего источника, k – молярная плотность, ω_k – интенсивность производства моля компонента в единице объема смеси за счет химических реакций, k – номер компонента.

Уравнения (2.1)-(2.3) дополняются определяющими соотношениями:

$$\rho = \sum_{k=1}^{N_C} W_k X_k \quad (2.4)$$

$$p = R_G T \sum_{k=1}^{N_C} X_k \quad (2.5)$$

$$E_T = R_G T \sum_{k=1}^{N_C} \left(\hat{H}_k(T) - 1 \right) X_k + \frac{1}{2} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \quad (2.6)$$

$$\hat{\omega}_k = \sum_{r=1}^{N_R} (\nu''_{kr} - \nu'_{kr}) k_r(M_r, T) \left[\prod_{k=1}^{N_C} X_k^{\nu'_{rk}} - \frac{\chi_r}{K_r(T)} \prod_{k=1}^{N_C} X_k^{\nu''_{rk}} \right] \quad (2.7)$$

Здесь: N_C – число компонентов газовой смеси, R_G – универсальная газовая постоянная, $\hat{H}_k(T)$ – зависимость безразмерной молярной энтальпии от температуры, определяемая моделью термодинамики (табулированная), N_R – число реакций в химико-кинетической модели, ν'_{rk}, ν''_{rk} – входящие и исходящие стехиометрические коэффициенты химических реакций, $k_r(M_r, T)$ – коэффициент скорости прямой реакции, определяющийся моделью химической кинетики, M_r – коэффициент влияния третьих (не меняющих состав) тел в химическом взаимодействии (определяется моделью химической кинетики), χ_r – признак обратимости химической реакции (1 – обратима, 0 – нет), $K_r(T)$ – константа равновесия химической реакции, определяется моделью термодинамики участвующих в реакции компонентов. W_k – молярная масса компонента смеси.

Соотношение (2.4) – формула расчета для плотности смеси компонент, (2.5) – уравнение состояния в форме зависимости давления от температуры и молярных плотностей, (2.6) – расчет полной энергии единицы объема

газовой смеси, (2.7) – расчет интенсивности производства моля компонента в единице объема смеси за счет химических реакций.

Зависимости $k_r(M_r, T)$ могут быть достаточно сложными, и все необходимые данные для них содержатся в выбранной кинетической модели. Сложными являются и зависимости $\hat{H}(T)$, $K_r(T)$. Первая определяется моделью термодинамики компонента, вторая – моделями термодинамики компонентов, входящих в заданную реакцию, и стехиометрическими коэффициентами при этих компонентах.

2.1.2 Термодинамические соотношения и модели кинетики горения

Горючая смесь представляет собой смесь совершенных газов, уравнение состояния которой (2.5) приведено ранее. В настоящем разделе укажем, каким образом рассчитываются температурные зависимости теплоемкости, энтальпии и энтропии компонент, а также соответствующие значения для смеси на основе параметров для компонент. Следует отметить, что зависимость удельной внутренней энергии единицы массы компоненты от температуры, но не от объема – следствие использования модели совершенного газа. Будем рассматривать теплоемкость единицы моля компонента k как функцию температуры, интерполированную полиномом степени $P \geq 0$ на интервале $[T_{\min}, T_{\max}]$, при этом молярную теплоемкость при постоянном давлении обезразмеривается на значение универсальной газовой постоянной R_G :

$$\hat{C}_k = \frac{C_{Pk}}{R_G} = \sum_{i=0}^P a_{k,i} T^i \quad (2.8)$$

Следует отметить, что на значения безразмерной теплоемкости $\hat{C}_k$ накладывается важное физическое ограничение: во всех случаях $\hat{C}_k \geq 2.5$, минимальное же значение соответствует теплоемкости одноатомного газа без возбуждения внутренних степеней свободы (осцилляций электронных оболочек, что может проявиться у некоторых газов при повышенной температуре).

Энтальпия связана с теплоемкостью соотношением:

$$H_k = \int_{T_{ref}}^T C_{P,k}(\theta) d\theta + H_k^F \quad (2.9)$$

где H_k^F – энтальпия формирования моля компонента при $T = T_{ref}$. С учетом соотношений (2.8) и (2.9) выражение для безразмерной энтальпии можно представить в виде:

$$\begin{aligned} \hat{H}_k &= \frac{H_k}{R_G T} = \sum_{i=0}^P \frac{a_{k,i}}{i+1} T^i + \frac{a_k^H}{T} \\ a_k^H &= \frac{H_k^F}{R_G} - \sum_{i=0}^P \frac{a_{k,i}}{i+1} T_{ref}^{i+1} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Энтропию единицы моля компоненты совершенного газа для заданной температуры и давления можно вычислить следующим образом:

$$S_k = \int_{T_{ref}}^T \frac{C_{P,k}(\theta)}{\theta} d\theta - R_G \ln \frac{p}{P_{ref}} + S_k^F \quad (2.11)$$

где S_k^F – энтропия формирования компонента при давлении P_{ref} и температуре T_{ref} . С учетом соотношений (2.9), (2.10) выражение для безразмерной зависимости энтропии от температуры при имеет вид:

$$\begin{aligned} \hat{S}_k &= \frac{S_k}{R_G} = a_{k,0} \ln T + \sum_{i=1}^P \frac{a_{k,i}}{i} T^i + a_k^S \\ a_k^S &= \frac{S_k^F}{R_G} - a_{k,0} \ln T_{ref} + \sum_{i=1}^P \frac{a_{k,i}}{i} T_{ref}^i \end{aligned} \quad (2.12)$$

Формулы (2.9), (2.10) и (2.12) имеют место лишь внутри интервала $T \in [T_{min}, T_{max}]$. Вне пределов этого интервала теплоемкость каждого газа полагаем постоянной и равной той, что соответствует T_{min} или T_{max} в зависимости от того, с какой стороны интервала находится температура, для которой вычисляется соответствующий параметр. Тем самым, формулы вне интервала упрощаются до того вида, который они бы имели при степени полинома $P = 0$ и значении коэффициента $a_{k,0}$ такого, чтобы соответствовать необходимому значению теплоемкости.

Исходные коэффициенты аппроксимации теплоемкости, а также значения энтальпии и энтропии формирования компонент – табличные данные, которые либо опубликованы явно, либо могут быть получены из опубликованных таблиц термодинамических данных, записанных в форматах CHEMKIN-II, CHEMKIN-III [193] или данных о теплоемкостях газов при различных значениях температуры. Примеры подобных публикаций: [194; 195]. Для того, чтобы получить коэффициенты $a_{k,i}$, $a_{H,i}$, $a_{S,i}$ для единого интервала $[T_{\min}, T_{\max}]$, используется регрессия, основанная на методе минимальных квадратах. Результаты расчета этих коэффициентов приведены в Таблице 8, помещенной в Приложении A.5.

Применение значений безразмерной энтальпии в математической модели указано в формуле (2.6) для расчета полной энергии газовой смеси. Ниже покажем, как используется безразмерная энтропия компонент при расчете констант равновесия обратимых реакций.

Интенсивность реакции рассчитывается формулой (2.7), в которой нами не указано явно, как конкретно рассчитывается коэффициент скорости реакции $k_r(M_r, T)$ и константа равновесия $K_r(T)$.

Константа равновесия рассчитывается на основе стехиометрических коэффициентов реакции и безразмерных молярных энтальпии и энтропии вовлеченных в реакцию компонент следующим образом:

$$\ln K_r(T) = - \sum_{k=1}^{N_C} (\nu''_{rk} - \nu'_{rk}) \left(\hat{H}_k(T) - \hat{S}_k(T) - 1 \right) + \left(\sum_{k=1}^{N_C} (\nu''_{rk} - \nu'_{rk}) \right) \ln \frac{P_{ref}}{R_G T} \quad (2.13)$$

В выражении (2.13) используется условие химического равновесия при постоянном объеме, отчего в первом члене суммируется безразмерная энергия Гельмгольца, а не Гиббса, которая требуется для условия постоянного давления. В безразмерном виде эти термодинамические потенциалы различаются на единицу.

Коэффициент скорости реакции может вычисляться тремя различными способами, в зависимости от того, каким образом в реакции участвует «третье», то есть не изменяемое, тело. Его молярную плотность обозначим $[M_r]$, а три варианта вычисления коэффициента $k_r(M_r, T)$ будем различать

индексом $\varepsilon_M = 0|1|2$. В первом варианте (0) зависимость от третьего тела отсутствует, во втором (1) она вычисляется простым образом, в третьем (2) - скорость реакции имеет различную зависимость в зависимости от давления (пропорционального $[M_r]$), такие реакции называют “выпадающими” (falloff, по терминологии [193]).

$$k_r([M_r], T) = \begin{cases} A_r(T) & \varepsilon_M = 0 \\ [M_r]A_r(T) & \varepsilon_M = 1 \\ A_r^\infty(T) \frac{P_r}{P_r+1} F_r(P_r, T), P_r = \frac{A_r^0(T)[M_r]}{A_r^\infty(T)} & \varepsilon_M = 2 \end{cases} \quad (2.14)$$

Здесь $A_r(T)$ – выражения в виде расширенной функции Аррениуса от температуры (с различными коэффициентами для A_r^0, A_r^∞ для выпадающих реакций), имеющие вид:

$$\ln A_r = a_r + b_r \ln T - \frac{e_r}{R_G T} \quad (2.15)$$

Значение же множителя F_r равно единице (расчет по Линдеману), либо вычисляется по Троэ сложным выражением [196].

2.1.3 Тестирование кинетических механизмов

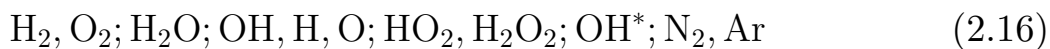
Для изучения ячеистой структуры детонационной волны в смесях водород-кислород и водород-воздух были рассмотрены следующие кинетические механизмы:

- Механизм З. Хонга [197].
- Механизм группы А.М. Терезы [198], подсистема горения водорода
- Механизм GRI Mech 3.0 [199], подсистема горения водорода
- Механизм У. Мааса [200], подсистема горения водорода.
- Механизм Ли-Джао-Казаков-Драер [201]
- Механизм Ф. Вильямса [202].

Таблицы данных кинетических механизмов представлены в Приложении **A.6**.

При горении водорода с кислородом, помимо основного продукта реакции, то есть водяного пара, образуется и несколько радикалов, или

компонентов, не существующих при нормальных условиях в стабильном состоянии длительное время. Горючая смесь может состоять из следующих компонентов:



Точкой с запятой в перечне (2.16) отделены группы химических компонентов, играющие различную роль в реакциях. Слева направо: исходные горючие компоненты (включая окислитель), продукты, легкие радикалы (реакции с ними и при их посредстве проходят весьма быстро), тяжелые радикалы (реакции с ними проходят медленнее), возбужденное состояние гидроксила (во многом отвечает за свечение горючей смеси, является легким радикалом, присутствует не во всех механизмах), нейтральные компоненты (азот считается нейтральным, поскольку реакции с его участием идут медленнее, чем происходит горение).

Результаты тестирования перечисленных выше механизмов по задержкам воспламенения для стехиометрической водородно-воздушной смеси состава: $\text{C}_{\text{H}_2}:\text{C}_{\text{O}_2}:\text{C}_{\text{N}_2}:\text{C}_{\text{Ar}}=2:1:4:0.05$, (ненормированные молярные доли C_k) различных начальных температур и давлений представлены на рисунках 2.1 и 2.2. Следует отметить большой разброс полученных значений для некоторых механизмов. Особенно сильно выделяются механизмы GRI Mech 3.0 и У. Мааса с немонотонной зависимостью задержки воспламенения при росте давления или температуры. После плавного снижения задержки воспламенения с ростом давления при достижении некоторого критического значения у них наблюдаются существенное повышение значения задержки, которое с дальнейшим ростом вновь начинает уменьшаться.

На графиках зависимости задержки от температуры также заметны существенные отличия для этих механизмов. С уменьшением температуры при достижении некоторого значения наблюдается практически скачкообразный рост задержки. Остальные механизмы демонстрируют относительно сходное друг с другом поведение с небольшими отличиями по временам задержки.

Можно заметить, что процесс выхода на равновесное состояние у кинетических механизмов отличается, что особенно заметно на динамике радикалов, их концентрации и скорости выхода. Их поведение может критически влиять на задержку воспламенения в смеси, что в свою очередь

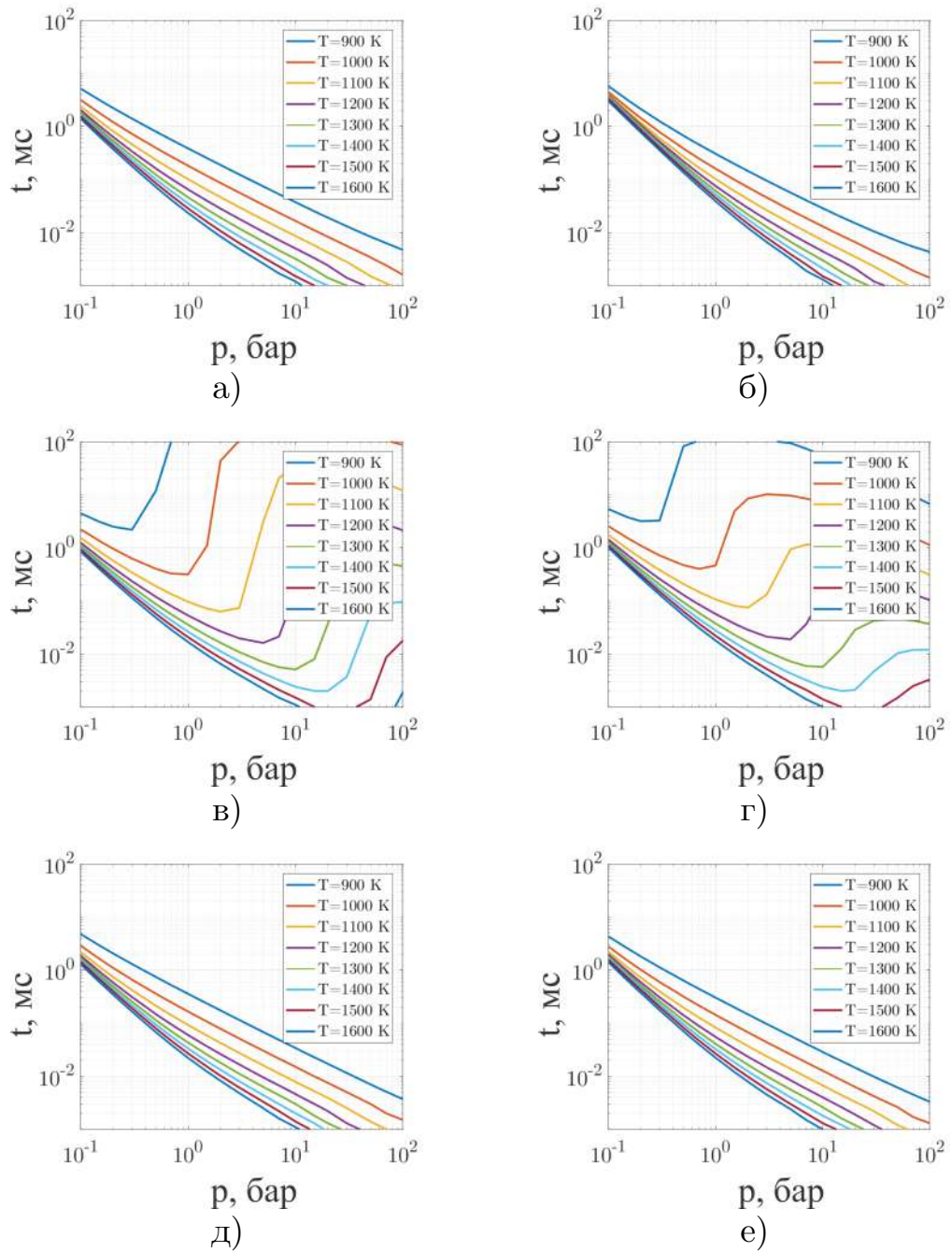
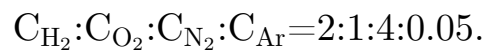


Рисунок 2.1 — Зависимость времени задержки воспламенения от давления для различных температур для кинетического механизма: а) З. Хонга [197]; б) группы А.М. Терезы [198]; в) GRI Mech 3.0 [199]; г) У. Мааса [200]; д) Ли-Джао-Казаков-Драер [201]; е) Ф. Вильямса [202]. Смесь



оказывает влияние на протекающие при моделировании процессы горения и детонации.

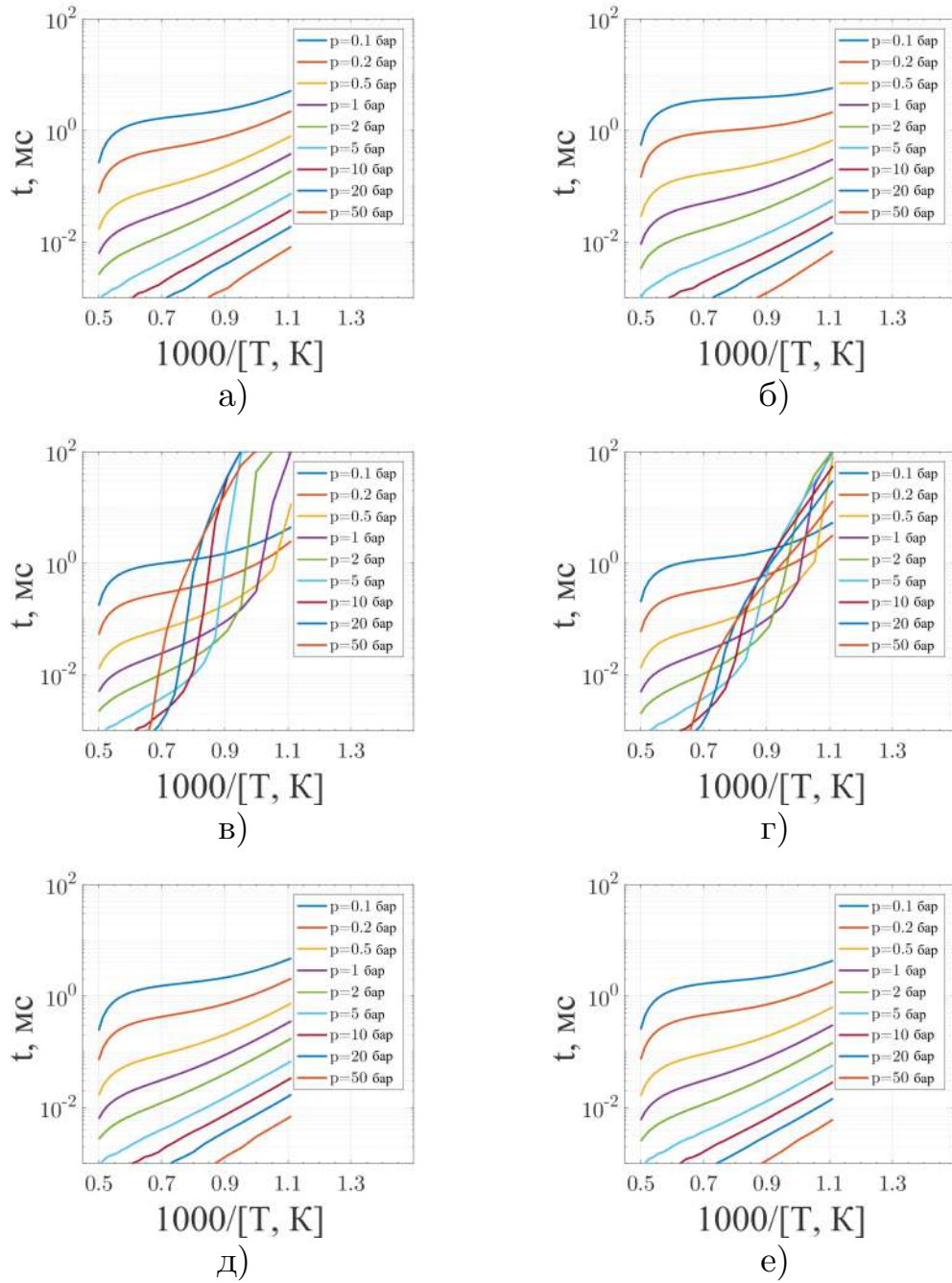


Рисунок 2.2 — Зависимость времени задержки воспламенения от температуры для различных давлений для кинетического механизма: а) З. Хонга [197]; б) группы А.М. Терезы [198]; в) GRI Mech 3.0 [199]; г) У. Мааса [200]; д) Ли-Джао-Казаков-Драер [201]; е) Ф. Вильямса [202]. Смесь $C_{H_2}:C_{O_2}:C_{N_2}:C_{Ar}=2:1:4:0.05$.

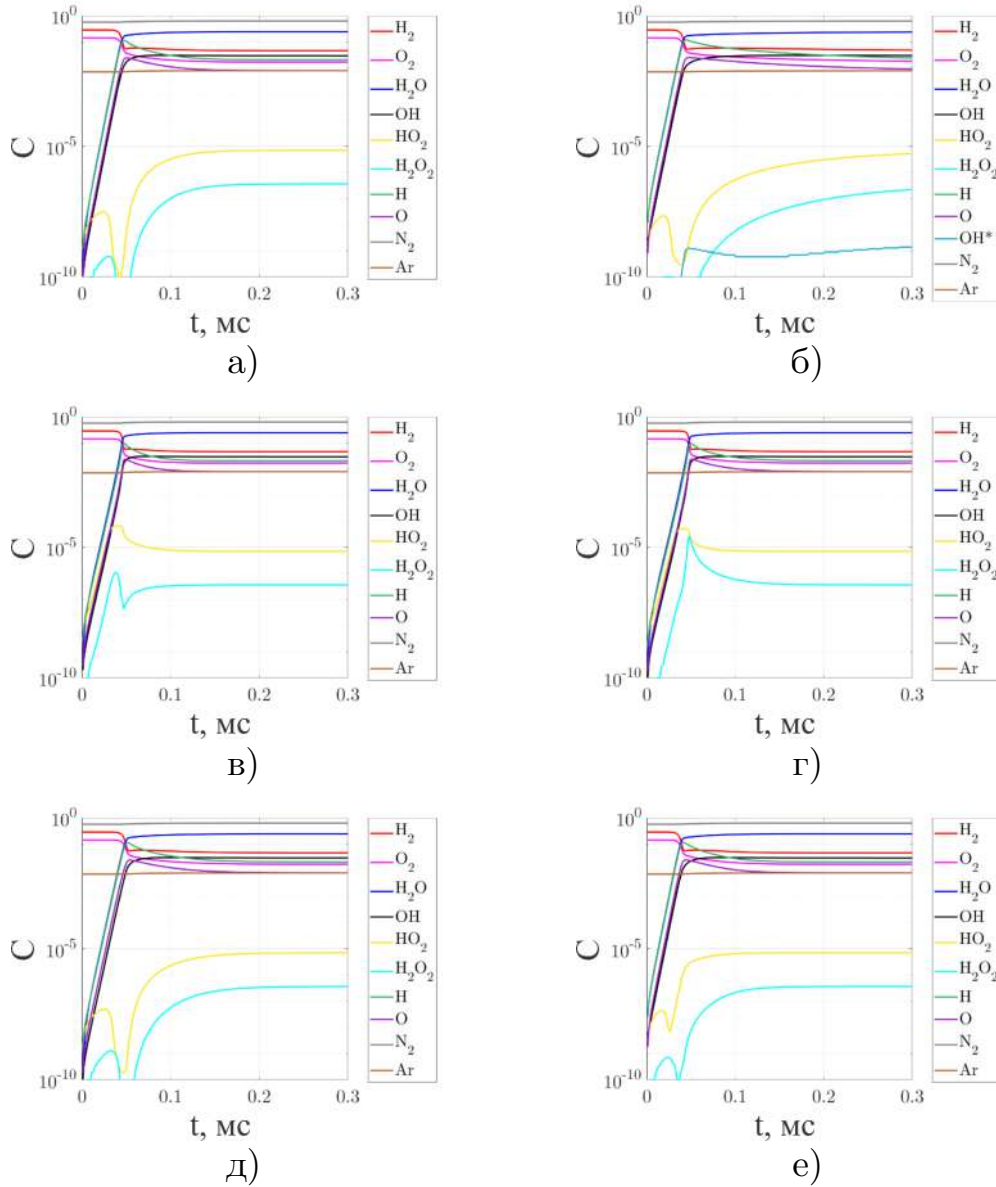


Рисунок 2.3 — Эволюция молярных долей компонентов в водородно-воздушной смеси $C_{H_2}:C_{O_2}:C_{N_2}:C_{Ar}=2:1:4:0.05$ для нульмерной задачи с начальной температурой $T = 1200$ К и давлением $p = 1$ атм для кинетического механизма: а) З. Хонга [197]; б) группы А.М. Терезы [198]; в) GRI Mech 3.0 [199]; г) У. Мааса [200]; д) Ли-Джао-Казаков-Драер [201]; е) Ф. Вильямса [202].

2.1.4 Расчет параметров детонационной волны Чепмена - Жуге и пика Неймана

Параметры волны детонации Чепмена - Жуге строятся на основе условий на сильном перемещающемся по среде разрыве:

$$\rho_1 (v_1 - D) = \rho_0 (v_0 - D) \quad (2.17)$$

$$\rho_1 (v_1 - D)^2 + p_1 = \rho_0 (v_0 - D)^2 + p_0 \quad (2.18)$$

$$h(T_1, Y_1^1, \dots, Y_{N_C}^1) + \frac{(v_1 - D)^2}{2} = h(T_0, Y_1^0, \dots, Y_{N_C}^0) + \frac{(v_0 - D)^2}{2} \quad (2.19)$$

Здесь индексы 0 и 1 соответствуют состояниям среды перед волной и за ней, D – скорость волны в лабораторной системе отсчета, v – скорость газа по нормали к движению волны, h – энтальпия единицы массы смеси, зависящая от температуры и состава Y_k (набора массовых долей компонент).

Состояние перед волной считается полностью заданным, причем $v_0 = 0$ (газ перед волной покоится в лабораторной системе отсчета). К системе (2.17) - (2.19) добавляется условие химического равновесия позади волны.

Этих условий недостаточно, чтобы рассчитать термодинамические параметры волны детонации Чепмена - Жуге и ее скорость, так как они соответствуют всей ветви кривой Гюгонио. Чтобы получить на ней точку, соответствующую волне Чепмена-Жуге, можно использовать свойство минимума скорости распространения волны D в этой точке.

В общем случае, чтобы получить скорость волны детонации Чепмена - Жуге, используется итерационный алгоритм, содержащий в себе три цикла. Алгоритм был разработан [203] и реализован с модификациями. Внутренний цикл алгоритма - нахождение состояния химического равновесия для условий заданной плотности и внутренней энергии. Используется итерационный процесс минимизации свободной энергии Гельмгольца смеси с дополнительным условием сохранения массы каждого ее компонента. Алгоритм реализован на основе публикации о программе расчета химического равновесия газовой смеси [204].

Средний цикл алгоритма - по заданной плотности конечного состояния, большей исходной плотности, и заданным исходным данным перед волной, рассчитать точку на адиабате Гюгонио и все параметры за волной в этой точке, включая скорость волны. Для получения состояния смеси за волной как раз и используется внутренний цикл; итерации же на среднем уровне связаны с тем, что система (2.17) - (2.19) не линейна даже при условии известности состава смеси за волной. Неизвестные, относительно которых решается система двух нелинейных уравнений – температура за волной T_1 и скорость волны D , а уравнениями – дисбалансы (2.17) и (2.19), которые требуется обнулить; уравнение (2.17) используется в качестве подстановки. Для решения используется метод Ньютона - Рафсона. Внешний цикл алгоритма - нахождение на верхней ветви кривой Гюгонио точки, в которой скорость волны D минимальна. Для этого используется итерационный метод минимизации золотого сечения вместо более сложного метода, предложенного [203].

Для того, чтобы найти пик Неймана и условия позади пика Неймана предполагаем, что в структуре детонационной волны лидером является ударная волна, на которой состав смеси не меняется, но которая движется со скоростью волны детонации Чепмена - Жуге. Для расчета условий на нем пользуются системой (2.20) - (2.22), в которой известны начальные условия (с индексом 0) и скорость волны D . Обозначив индексом 2 условия за пиком Неймана, получим для них соотношения (2.17) - (2.19).

$$\rho_2(v_2 - D) = \rho_0(v_0 - D) \quad (2.20)$$

$$\rho_2(v_1 - D)^2 + p_2 = \rho_0(v_0 - D)^2 + p_0 \quad (2.21)$$

$$h(T_2, Y_1^0, \dots, Y_{N_C}^0) + \frac{(v_2 - D)^2}{2} = h(T_0, Y_1^0, \dots, Y_{N_C}^0) + \frac{(v_0 - D)^2}{2} \quad (2.22)$$

Следует здесь обратить внимание, что в системе (2.17) - (2.19) набор массовых или молярных долей компонентов при переходе через скачок не меняется. Задав значение скорости D равным скорости волны Чепмена - Жуге и решая систему (2.20) - (2.22) можно получить величины давления и температуры в пике Неймана. Стоит отметить, что это давление значительно выше давления за волной Чепмена - Жуге, а температура, напротив

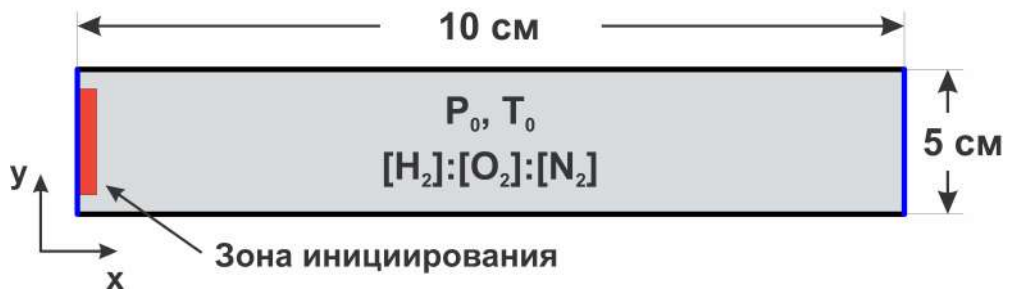


Рисунок 2.4 — Схема постановки задачи.

- ниже. За головной ударной волной следует зона, в которой смесь сгорает, температура ее повышается, а давление падает.

2.2 Постановка задачи о детонации в плоском канале

Канал рассматривается как плоская прямоугольная область, на границах которой требуется выполнение граничных условий, соответствующих используемой системе дифференциальных уравнений (2.1) - (2.3) (см. рисунок 2.4). 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.

В начальном состоянии область заполнена газовой смесью, у которой заданы давление P_0 , температура T_0 и отношение молярных плотностей (ненормированные молярные доли C_k): $H_2:O_2:N_2$. Для не участвующих в отношении компонентов значения нулевые. Чтобы получить из этих величин молярные плотности компонентов, используется формула, следующая из формул определения плотности смеси (2.4) и уравнения состояния (2.5):

$$X_{0k} = \frac{P_0}{R_G T_0} \cdot \frac{C_k}{\sum_{j=1}^{N_C} C_j} \quad (2.23)$$

Границы области, которые представляют собой две боковые стороны прямоугольника с координатами $y = 0$ и $y = H$ (назовем нижняя и верхняя) и две торцевые с координатами $x = 0$ и $x = L$ (назовем левая и правая). На каждой из границ можно задать условие непроницаемой стенки, которое для системы (2.1) - (2.3) означает условие непротекания:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2.24)$$

где $\mathbf{n}$ – вектор нормали к стенке (для определенности здесь и далее считаем нормаль внешней и единичной).

Кроме того, можно на каждой из границ (независимо) задать условие открытого выхода, которое реализуется следующим образом:

$$\begin{cases} U = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0 \Rightarrow \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0; \\ 0 \leq U < a \Rightarrow p = P_0. \end{cases} \quad (2.25)$$

Здесь a – местная скорость звука. Условие (2.25) означает, что если нормальная скорость истечения газа меньше нуля (то есть имеет место приток, а не истечение), то приток блокируется, ставится условие стенки (2.24). Если же нормальная скорость истечения меньше скорости звука, на стенке задается условие непрерывности давления. При сверхзвуковом истечении граничное условие не ставится. Реализация такого граничного условия может быть эффективно осуществлена в рамках использования метода расчета AUSM (Advection Upstream Splitting Method) [82] и его вариантов, основанных на расщеплении компрессионного потока сквозь грань по Ван Лиру [81]. Третий вариант граничных условий задается только на боковых стенках, когда моделируется трехмерное течение в узком зазоре между двумя коаксиальными цилиндрами в двумерной постановке, а канал является плоской разверткой цилиндрической поверхности, разрезанной по линии вдоль оси цилиндра. Боковые стенки канала являются краями разреза. Это граничное условие можно записать в виде:

$$\forall x : \varphi(x, 0) = \varphi(x, L) \quad (2.26)$$

где φ – любой распределенный параметр течения газа (в том числе это может быть пространственная производная от параметра). Это периодическое граничное условие, моделирующее прямоугольную область как внутреннюю поверхность цилиндра. Эффективная реализация такого условия осуществляется не выставлением его явно для параметров течения, а изменением топологии расчетной сетки, то есть ее “сшиванием”.

Для того, чтобы инициировать процесс химических реакций в начальный момент времени $t = 0$ в некоторой прямоугольной области зажигания

Ω_{ign} , примыкающей к левой границе канала $x = 0$, начинает подводиться внешняя энергия в течение времени t_{ign} с интенсивностью Q_0 (согласно уравнению (2.3)), которая определяется как:

$$Q_0(t, x, y) = \begin{cases} Q_{ign}, & 0 \leq t \leq t_{ign}, (x, y) \in \Omega_{ign} \\ 0, & t > t_{ign} \text{ или } (x, y) \notin \Omega_{ign}. \end{cases} \quad (2.27)$$

Область зажигания Ω_{ign} имеет форму прямоугольника и примыкает к левой границе:

$$\begin{aligned} \Omega_{ign} &= [0, x_{ign}] \times [y_{ign}^{\min}, y_{ign}^{\max}] \\ |\Omega_{ign}| &= x_{ign} (y_{ign}^{\max} - y_{ign}^{\min}) \end{aligned} \quad (2.28)$$

Суммарная энергия зажигания при этом равна:

$$E_{ign} = Q_{ign} |\Omega_{ign}| t_{ign} = t_{ign} x_{ign} (y_{ign}^{\max} - y_{ign}^{\min}) \quad (2.29)$$

Можно использовать подход в зоне зажигания неравномерно по пространству. Возмущения, вносимые в мощность зажигания, могут как локально ослаблять ее, так и усиливать. Они определяются при помощи следующей функции:

$$\begin{aligned} \tilde{Q}(x, y) &= \begin{cases} \exp \left[\sum_{p=1}^{N_P} q_p \exp \left(-(r_p/r_m)^2 \right) \right], & (x, y) \in \Omega_{ign} \\ 0, & (x, y) \notin \Omega_{ign}; \end{cases} \\ r_p &= \sqrt{(x - x_p)^2 + (y - y_p)^2} \end{aligned} \quad (2.30)$$

где точки (x_p, y_p) , или центры возмущений, равномерно распределены по области зажигания Ω_{ign} , а множители q_p равномерно распределены на отрезке $[-q_m, +q_m]$. Для генерации этих распределений используется равномерный генератор псевдослучайных чисел Парка - Миллера с дополнительным перемешиванием последовательности, такой генератор не зависит от библиотечной функции, встроенной в компилятор, и убирает зависимость от компилятора. Зависимость от расчетной сетки (в пределе бесконечно малых ячеек) у величины (2.30) также отсутствует. Окончательное значение мощности источника с учетом возмущений получается при помощи выражения:

$$Q = Q_0 \frac{\tilde{Q}|\Omega_{ign}|}{\int_{\Omega_{ign}} \tilde{Q} dx dy} \quad (2.31)$$

при этом можно показать, что суммарная энергия зажигания будет равна энергии от равномерного источника (2.29), то есть от величины и распределения пертурбаций зависеть не будет.

2.3 Результаты численного исследования

Для расчетов использовалась оригинальная программа, написанная на языке C стандарта ISO 89, которая не связана с конкретной операционной системой [X]. В ней используется система распараллеливания OpenMP с соответствующими библиотеками работы с нитями исполнения. Детали реализации численного алгоритма представлены в Приложении A.1.

2.3.1 Влияние начальной температуры смеси на ячеистую структуру

Ниже представлены результаты исследования ячеистой детонации с использованием кинетического механизма З. Хонг [197]. Кинетический механизм З. Хонг содержит 10 компонент: $[H_2O; OH; H; O; Ar; HO_2; H_2O_2; H_2; O_2; N_2]$ и 20 реакций без учета альтернативных ветвлений. Соответствующий список реакций представлен в Приложении A.6.

Рассматривалась прямоугольная область длиной 10 см и шириной 5 см (рисунок 2.4), на ее верхней и нижней границах ставилось условие непротекания, а правая и левая считалась открытой границей. Для инициирования детонации в область у левой границы шириной 0.25 см и длиной 5 см подводилась энергии 20 МВт/см³ в течении 1 мкс. В результате чего общее количество энергии на 1 см глубины области составило 25 Дж. Расчеты проводились для стехиометрической смеси состава: $[H_2]:[O_2]:[N_2]=2:1:4$ при

начальном давлении $P_0 = 1$ атм и нескольких начальных температурах $T_0 = 300$ К, 400 К, 500 К, 650 К.

На рисунке 2.5 представлено поле давления для двух моментов времени при начальной температуре смеси $T_0 = 300$ К, 400 К, 500 К и 650 К. Видно, что для всех случаев детонационная волна регулярную ячеистую структуру, а количество изломов ее фронта максимально при $T = 300$ К, и минимально при $T = 500$ К.

Из рисунка 2.5 видно, что передний фронт волны детонации не гладкий и имеет локальные искривления в точках изгиба 25 мкс, и для 50 мкс. При этом видны основные структуры, ячеистой детонации - поперечные волны, наиболее сильные вблизи переднего фронта, и затухающие в тылу, а также пучности давления в окрестности самого фронта, образующие тройные точки.

На рисунке 2.6 представлено поле модуля скорости продуктов детонации газовой смеси.

Скорость газа, как и давление отслеживает поперечные колебания, связанные с неустойчивостью фронта детонации. Вблизи левой границы скорость составляет 600 – 800 м/с и направлена в противоположную от направления распространения детонации сторону, а вблизи фронта детонации она направлена в сторону распространения. Между этими областями виден промежуток, где скорость мала и меняется знак компоненты вдоль оси. Место, где меняется знак скорости по мере развития процесса детонации смещается вправо.

На рисунке 2.7 изображено поле температуры для различной начальной температуры в моменты времени 25 и 50 мкс.

Поле температуры на рисунке 2.7 также показывает неровности фронта волны детонации, а за ним видны вихри при перемешивании высокотемпературных продуктов горения и локальные максимумы температуры в местах столкновений поперечных волн.

На рисунке 2.8 изображено распределение молярной доли (концентрации) радикала HO_2 в моменты времени 25 и 50 мкс при различной начальной температуре смеси. Этот радикал характерен тем, что его концентрация максимальна во фронтах реакции. Это позволяет регистрировать их положение, используя его распределение его молярной доли.

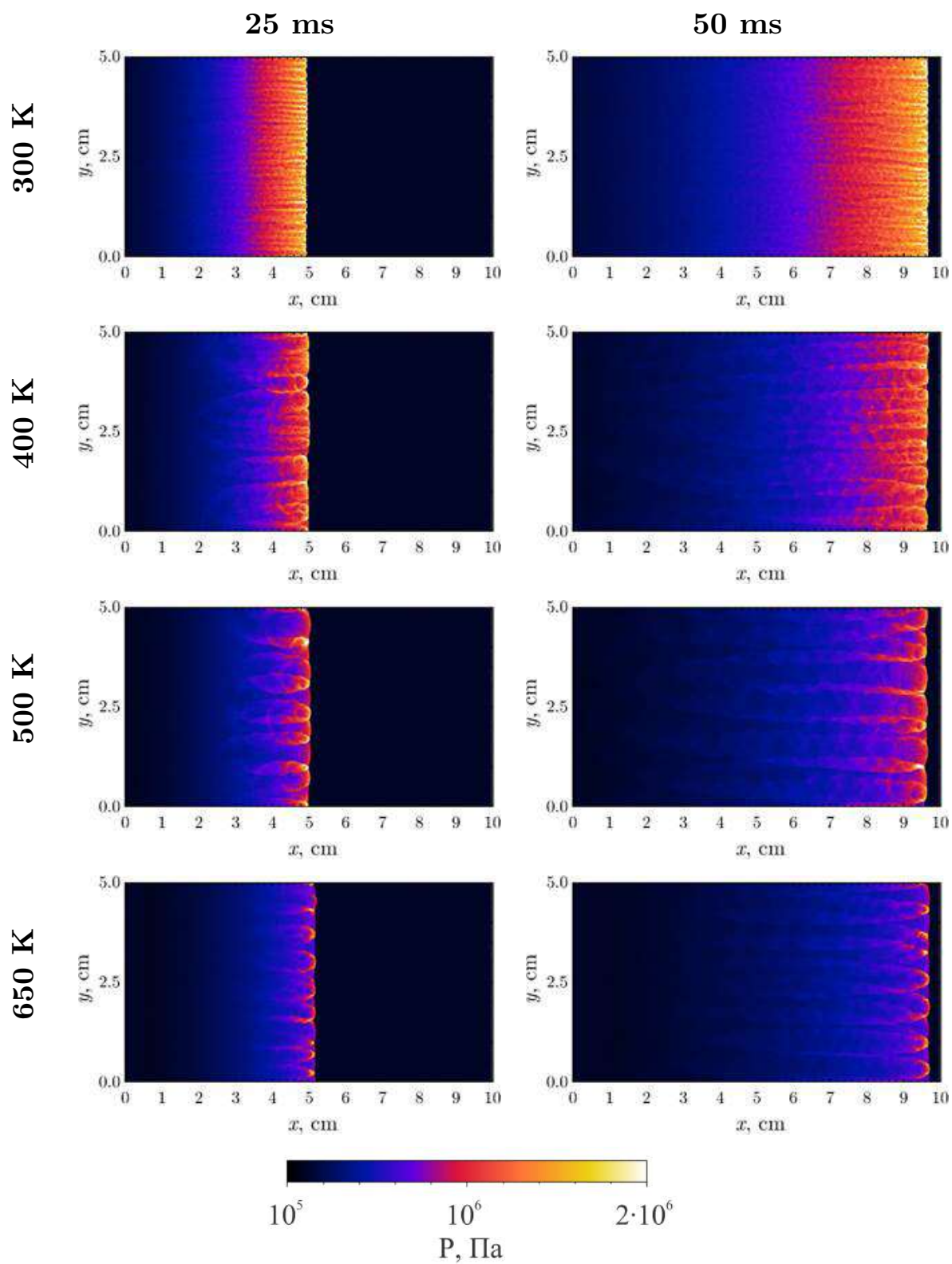


Рисунок 2.5 — Поле давления для случаев различной начальной температуры смеси для моментов времени 25 мкс и 50 мкс.

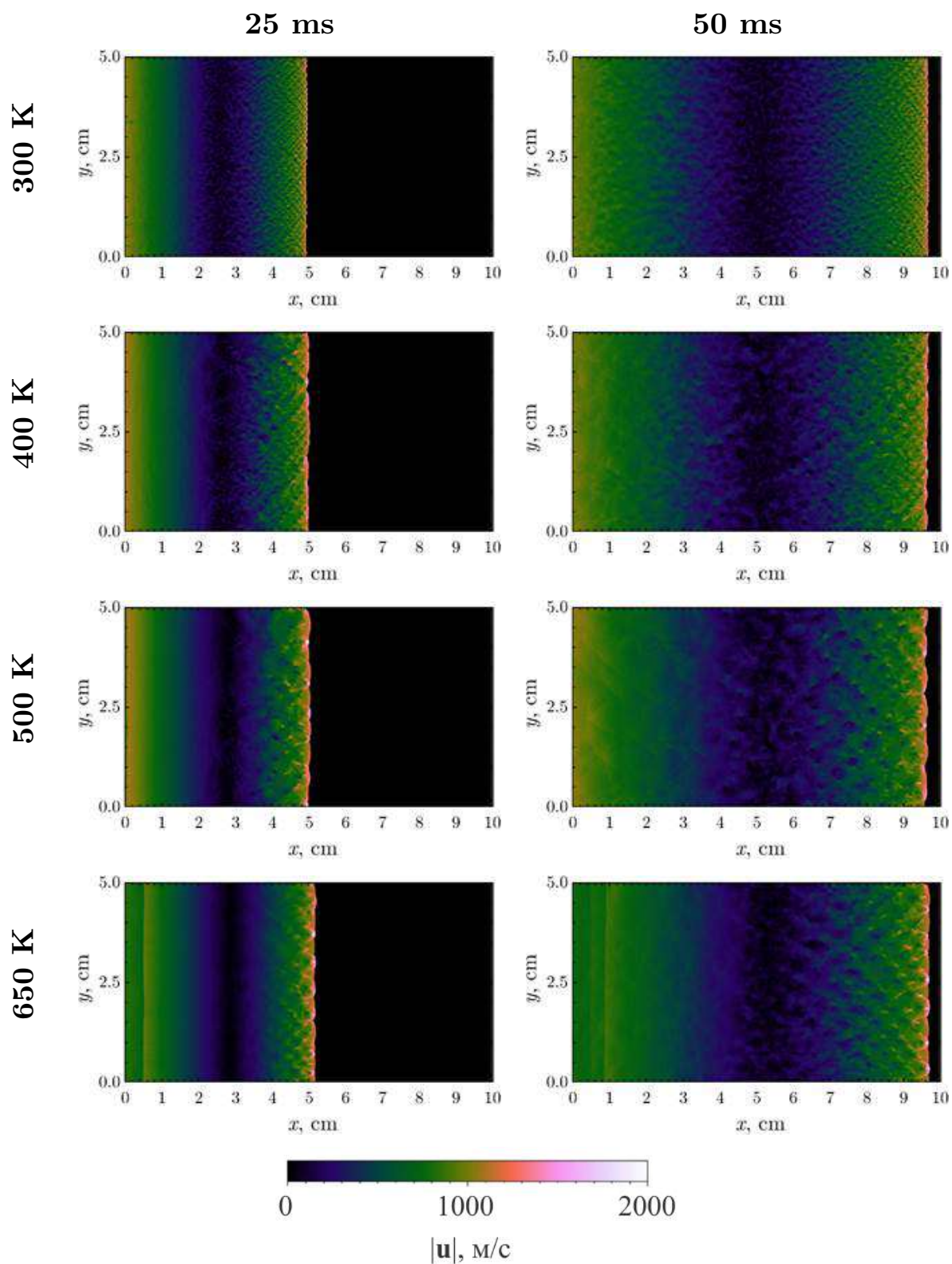


Рисунок 2.6 — Поле модуля скорости при различной начальной температуре смеси в моменты времени 25 мкс и 50 мкс

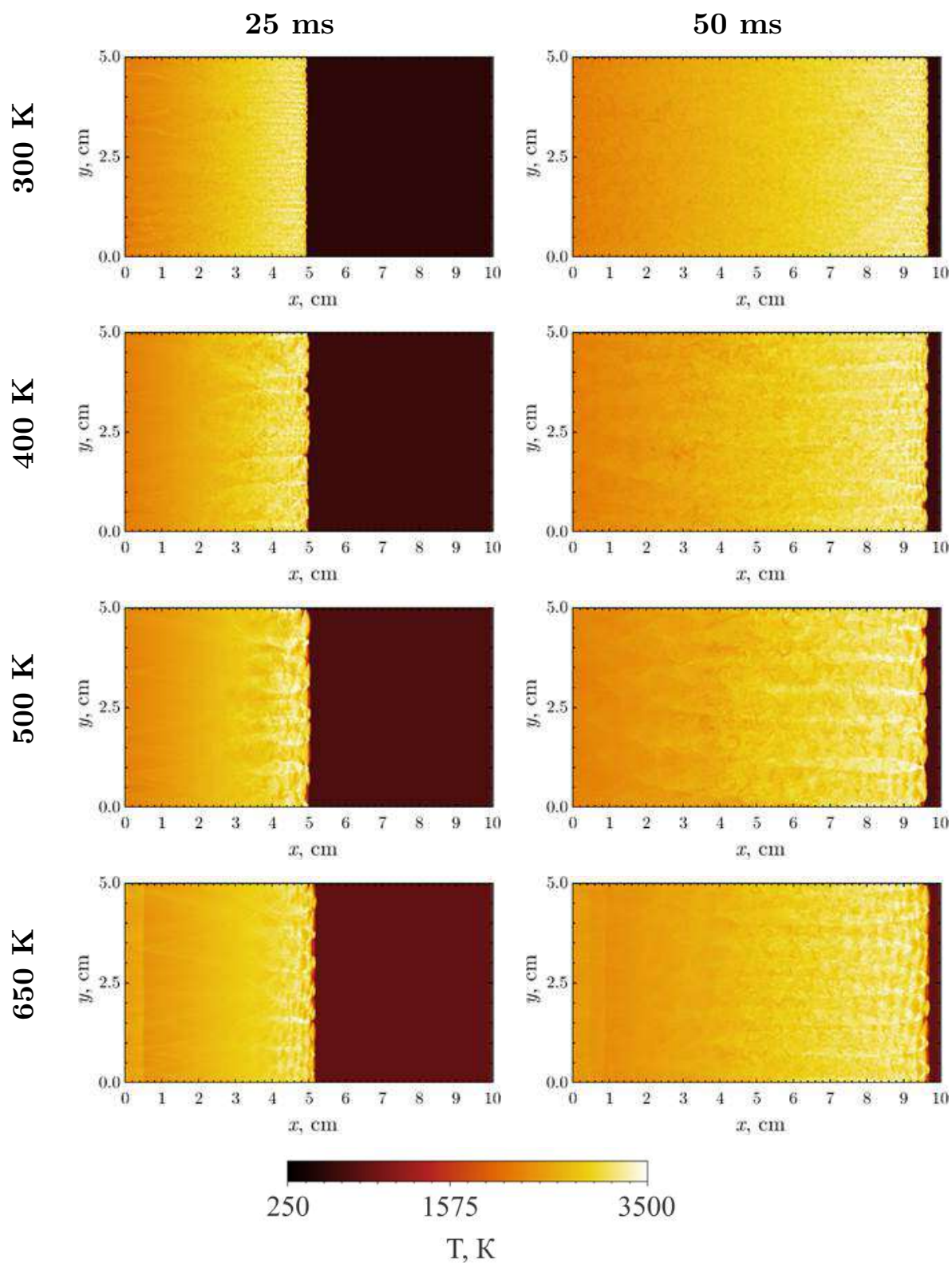


Рисунок 2.7 — Поле температуры при различной начальной температуре смеси в моменты времени 25 мкс и 50мкс

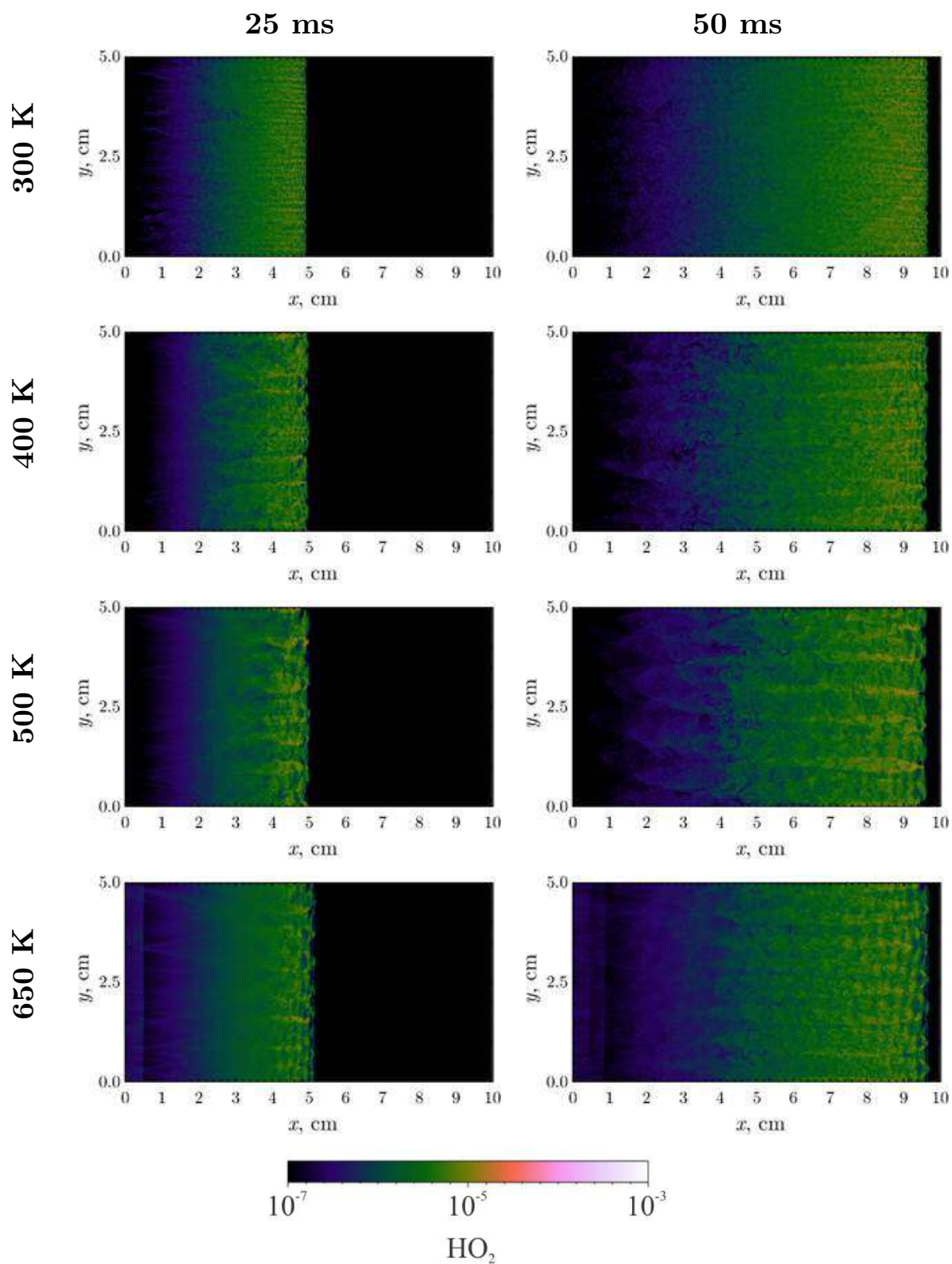


Рисунок 2.8 — Распределение молярной доли компонента NO_2 в моменты времени 25 мкс и 50 мкс при различной начальной температуре смеси.

Из рисунка 2.8 видно, однако, что увеличение доли H_2O_2 характеризует не только фронты горения, но и места столкновения локальных ударных волн в области сгоревшего газа, отчего фронты горения сильно размываются, и потому их детальная локализация с помощью H_2O_2 вызывает сомнение.

На рисунке 2.9 представлено распределение максимальных значений давления, зафиксированных в точках области к моменту времени 50 мкс при различной начальной температуре смеси.

Рисунок 2.9 показывает, что регистрация максимального давления в точках расчетной области за все время расчета позволяет получить наблюдаемую в реальных экспериментах сетку следов тройных точек с ячейками в форме ромбов. Размером ячейки, обозначаемым через λ , принято считать среднюю величину малой диагонали ромбов и согласно расчетам при четырех значениях начальной температуры получилось: $\lambda = 0.5$ см при 650 К, 0.7 см при 500 К, 0.4 см при 400 К и 0.2 см при 300 К.

На рисунке 2.10 представлено сравнение профилей среднего по поперечному сечению давления с давлением Чепмена–Жуге для различной начальной температуры смеси.

Из рисунка 2.10 видно, что в целом профили среднего по сечению давления подобны друг другу и при 25, и при 50 мкс от начала процесса. Они обнаруживают лишь небольшие колебания. Давление за волной Чепмена – Жуге для заданной температуры ниже пика, достигаемого средним давлением. Сам этот пик почти не меняется по значению для рассматриваемых времен.

На рисунке 2.11 изображено сравнение профилей максимального расчетного давления с давлением Чепмена–Жуге для различной начальной температуры смеси. Видно, что максимальное по сечению давление на порядок выше среднего, а для времени 25 мкс оно выше, чем для 50 мкс, что может объясняться некоторой стабилизацией фронта детонации. Колебания значений максимального давления в окрестности фронта весьма значительны. Максимальное давление за фронтом головной волны значительно превышает давление в точке Чепмена–Жуге.

На рисунке 2.12 представлено сравнение среднего по сечению давления с теоретическим значением давления в пике Неймана, полученным с помощью расчета условий в ударной волне, движущейся по невозмущенной смеси со скоростью, равной скорости волны детонации Чепмена – Жуге.

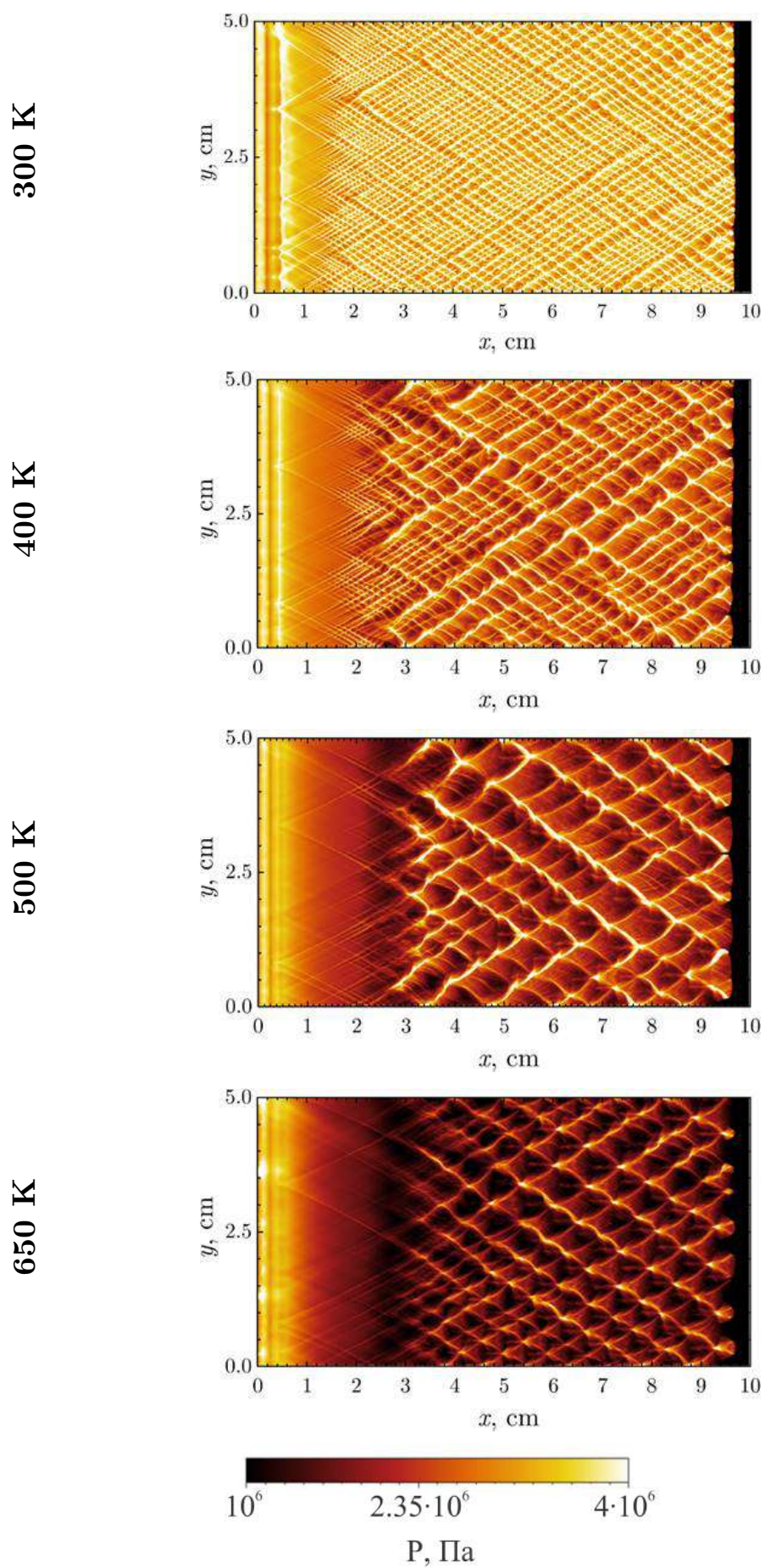


Рисунок 2.9 — Распределение максимальных значений давления, зафиксированных в точках области к моменту времени 50 мкс при различной начальной температуре смеси

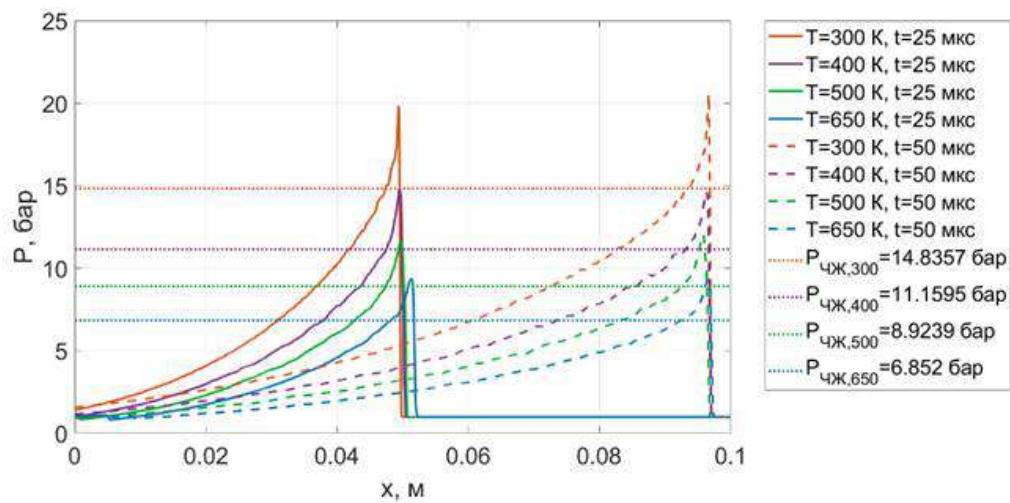


Рисунок 2.10 — Сравнение среднего по сечению давления с давлением позади волны детонации Чепмена – Жуге для различной начальной температуры смеси.

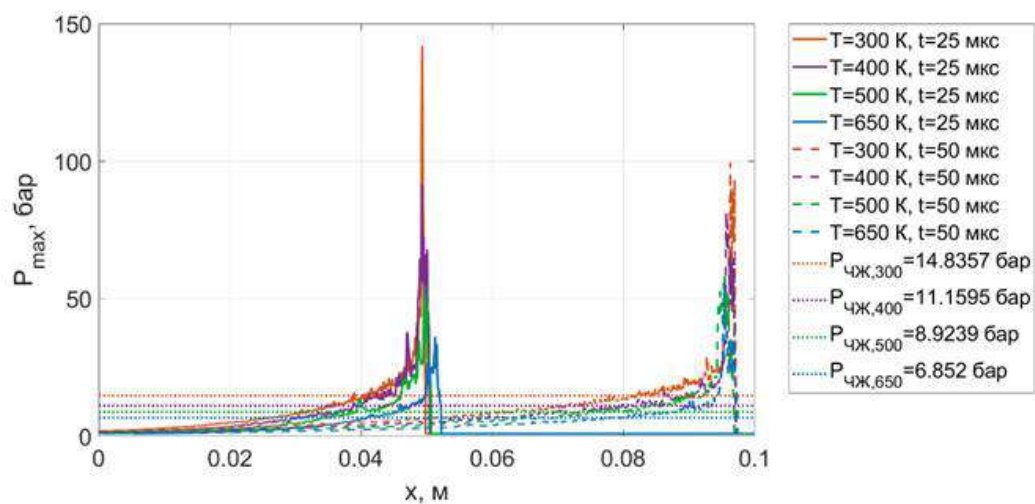


Рисунок 2.11 — Сравнение максимального расчетного давления с давлением Чепмена – Жуге в расчетной области для случаев различной начальной температуры смеси.

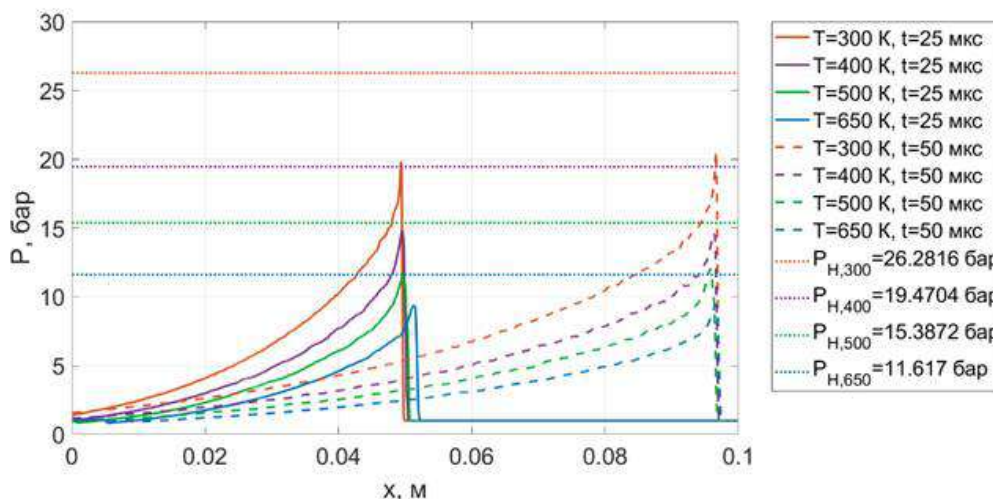


Рисунок 2.12 — Сравнение среднего расчетного давления с давлением в пике Неймана для области для случаев различной начальной температуры смеси.

Видно, что среднее по сечению расчетное давление ниже значения давления в пике Неймана для всех случаев начальной температуры.

На рисунке 2.13 представлено сравнение максимального по сечению давления для моментов времени 25 и 50 мкс с давлением в пике Неймана для различных исходных температур горючей смеси. Эти профили в своих пиках превышают теоретическое значение давления в пике Неймана в несколько раз. Это может быть связано с повышением давления за фронтом волны детонации при столеновании поперечных волн, что, естественно, не может быть учтено в одномерной модели, из которой выводится теоретическое значение величины давления в пике Неймана.

На рисунке 2.14 представлена зависимость скорости переднего фронта детонации (за эту скорость принимается скорость движения максимума пика переднего фронта давления пика) от времени в сравнении со скоростью волны детонации Чепмена – Жуге для всех значений исходной температуры, для которых проводились расчеты.

Из рисунка 2.14 видно, что вначале скорость волны детонации, значительно превышает скорость детонации Чепмена – Жуге (т.е. имеет место пересжатая детонация), из-за подвода в смесь большого количества энергии, необходимого для прямого инициирования детонации. Затем в течение 10 мкс скорость падает почти до скорости детонации Чепмена – Жуге, но затем для всех рассмотренных случаев начинаются ограниченные колебания скорости около скорости волны Чепмена – Жуге. Причем падения скорости (нижняя точка этих колебаний) оказываются значительно ниже

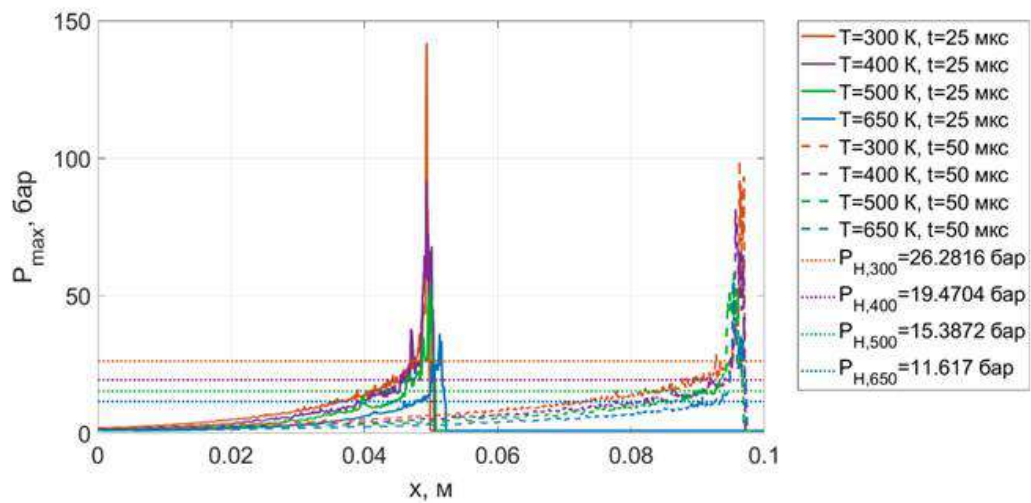


Рисунок 2.13 — Сравнение максимального расчетного давления с давлением в пике Неймана для области для случаев различной начальной температуры смеси.

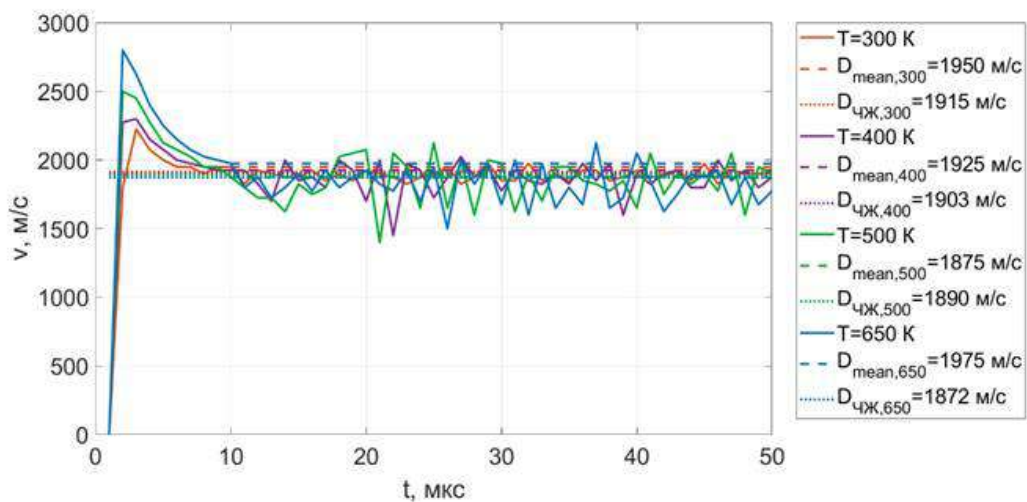


Рисунок 2.14 — Расчетная скорость детонационной волны и теоретическая скорость детонационной волны Чепмена-Жуге для случаев различной начальной температуры смеси.

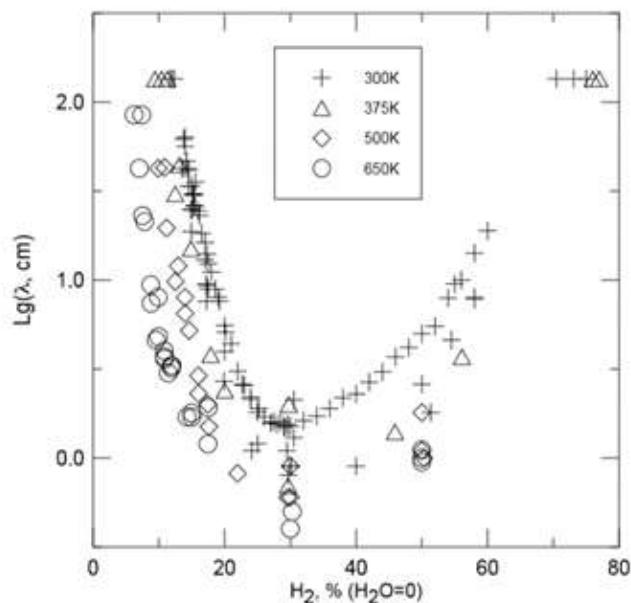


Рисунок 2.15 — Экспериментальные данные по размеру детонационных ячеек, на основе которых сделано обобщение в виде интерполяционной формулы в работе [85].

этой скорости, что соответствует продвижению фронта ударными волнами, идущими по несгоревшей газовой смеси. Волны эти догоняются детонационными волнами, что соответствует подъемам скорости продвижения фронта выше скорости волны Чепмена – Жуке. В целом процесс происходит хоть и однотипный, но в данном случае либо период его не установился, либо процесс принципиально апериодический, хоть и с определенными ограничениями на масштаб колебаний как по скорости продвижения фронта, так и по времени

2.3.2 Сравнение с экспериментальными данными по размеру детонационной ячейки

Для смеси водорода с воздухом, многочисленные экспериментальные данные по размеру детонационных ячеек λ , были обобщены с помощью интерполяционной формулы [85]. Некоторые из этих данных приведены на рисунке 2.15.

Формула, интерполирующая экспериментальные данные, которая была получена в работе [85], выглядит следующим образом:

$$\lg(\lambda) = \left(a - m + \left(\frac{b}{(A-k/B)^f} + h \cdot (A - g \cdot B)^2 + i \cdot (A - g \cdot B) \right) \cdot (1 + d \cdot C + e \cdot B \cdot C^2) \cdot \frac{j}{B} \right) \times (D - c) \cdot \left(\frac{1}{0.1-c} + n \cdot (D - 0.1) \right) + m \quad (2.32)$$

Здесь константами являются $a, b, c, d, e, f, g, h, i, j, k, m, n$, а параметрами, зависящими от состояния исходной смеси A, B, C, D . Значения констант:

$$\begin{aligned} a &= -1.133331 & f &= 0.997468 \\ b &= 45.9807 & g &= -0.0266646 & k &= -418.215 \\ c &= -0.157650 & h &= 8.74995 \cdot 10^{-4} & m &= 2.38970 \\ d &= 0.0465429 & i &= -0.047641 & n &= -8.42378 \\ e &= 3.59620 \cdot 10^{-7} & j &= 331.162 \end{aligned}$$

Параметры состояния исходной газовой смеси:

A – объемная доля H_2 , в процентах,

B – исходная температура, в градусах Кельвина,

C – объемная доля H_2O (водяного пара), в процентах,

D – исходное давление, в мегапаскалях ($1 \text{ атм} = 0.1 \text{ МПа}$).

Результатом расчета выражения (2.32) является десятичный логарифм от размера ячейки, выраженного в сантиметрах.

Экспериментальные данные по размеру ячеек на основе которых на рисунке 1.16 приведены кривые, рассчитанные по модифицированной интерполяционной формуле при начальном давлении смеси 0.1 МПа и четырех значениях температуры. По оси абсцисс отложено стехиометрическое соотношение φ по водороду для смеси с воздухом, равное единице для стехиометрической смеси. Слева изображены кривые для $\varphi \in [0, 3]$, а справа для $\varphi \in [0.5, 2.0]$, чтобы лучше разрешить поведение зависимости λ от φ для смеси в окрестности стехиометрического состава.

В таблице 1 для сравнения представлены данные экспериментов [85] и настоящих расчетов по среднему размеру детонационной ячейки.

Из таблицы 1 видно, что расчетные и экспериментальные значения размеров ячеек практически совпадают при температуре 500 и 650 К, причем прослеживается тенденция уменьшения размера ячейки с ростом температуры. В то же время для низких температур 300 К и 400 К

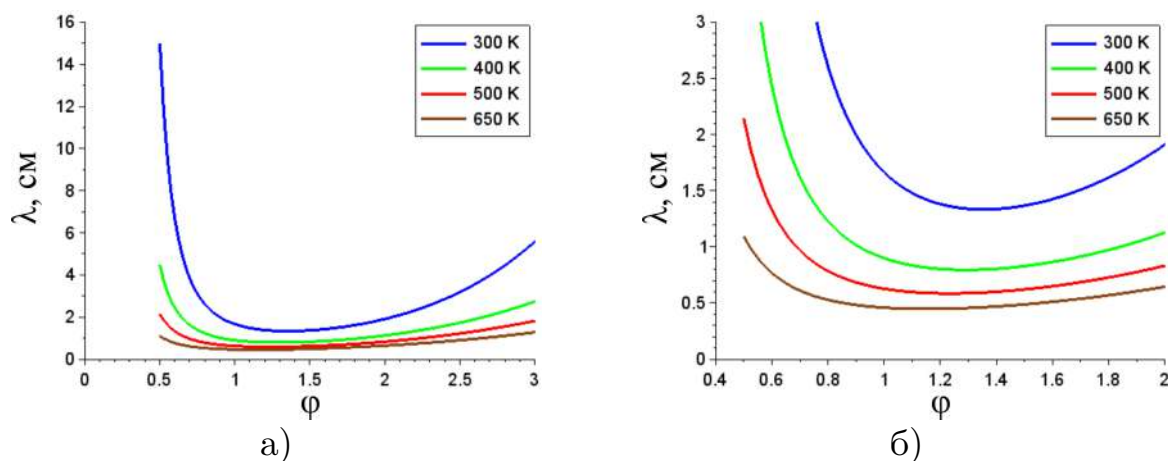


Рисунок 2.16 — Результаты интерполяции экспериментальных данных по размеру детонационной ячейки λ , от стехиометрического соотношения ϕ для смеси водорода с воздухом при давлении исходной смеси 0.1 МПа и четырех температурах: а) для $\phi \in [0, 3]$, б) для $\phi \in [0.5, 2.0]$.

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

Температура (К)	Экспериментальный размер ячейки (см)	Расчетный размер ячейки (см)
300	1.6	0.2 - 0.3
400	0.9	0.4 - 0.5
500	0.7	0.6 - 0.7
650	0.5	0.5 - 0.6

расчетная ячейка увеличивается в размерах с ростом температуры, а экспериментальная — уменьшается, как и при высоких.

Различные тенденции в эксперименте и теории можно объяснить тем, что на данные эксперимента большое влияние оказывает взаимодействие волны детонации с поверхностью в пограничном слое. В частности, обрыв цепей реакций при взаимодействии с материалом стенки и с самим напылением может привести к тому, что суммарная реакция может как замедлиться в результате изъятия из цепи промежуточных радикалов, таких как Н или ОН, так и ускориться при образовании при обрыве цепей конечного продукта с соответствующим выделением энергии. Во всех случаях следует отметить, что как близость стенки, так и состав напыления, служащего индикатором, влияют на кинетику химической реакции, следо-

вательно, и на размер детонационной ячейки, который очень чувствителен к кинетике.

Расчет проводится в 2D области без учета взаимодействия со стенкой. Граничные условия на боковых стенках могут быть закрытыми, открытыми или открытыми с одной стороны. Если взаимодействие со стенкой и учитывается, то лишь локально, а не по всему каналу, как было бы в случае рассмотрения пограничного слоя вблизи его стенок.

2.3.3 Влияние пространственной неоднородности теплоподвода на параметры детонации

В настоящем разделе представлены результаты численного исследования влияния на формирование ячеистой детонации пространственных неоднородностей в зоне зажигания, вносимых для ускорения процесса развития неустойчивости детонации. Предполагается, что энергия зажигания и время ее выделения фиксированы и составляют, как и ранее, 25 Дж и 1 мкс, соответственно. Но теперь вместо одного слоя, отмеченного красным на рисунке 2.4, энергия подводится в нескольких расположенных в зоне зажигания подзонах одинакового размера и формы, которые случайным образом распределены по ней.

Рассматривалась прямоугольная область длиной 10 см и шириной 5 см (рисунок 2.4), на ее верхней и нижней границах ставилось условие непротекания, а правая и левая считалась открытой границей.

Далее представлены результаты расчетов для смеси состава: $[H_2]:[O_2]:[N_2] = 2:1:4$ при начальных температуре $T_0 = 400$ К и давлении $P_0 = 1$ бар, в которых применялся кинетический механизм З. Хонг [197].

На рисунке 2.17 изображено поле давления в моменты времени 25 и 50 мкс для нескольких значений числа подзон энергоподвода случайно распределенными в зоне зажигания (Приложение А.7).

Из рисунка 2.17 видно, что поля давления заметно различаются на достаточно малых временах, прошедших с момента инициирования детонации. Можно также видеть, что неустойчивости возникают и усиливаются даже при нулевом значении числа источников неоднородностей, т.е. энер-

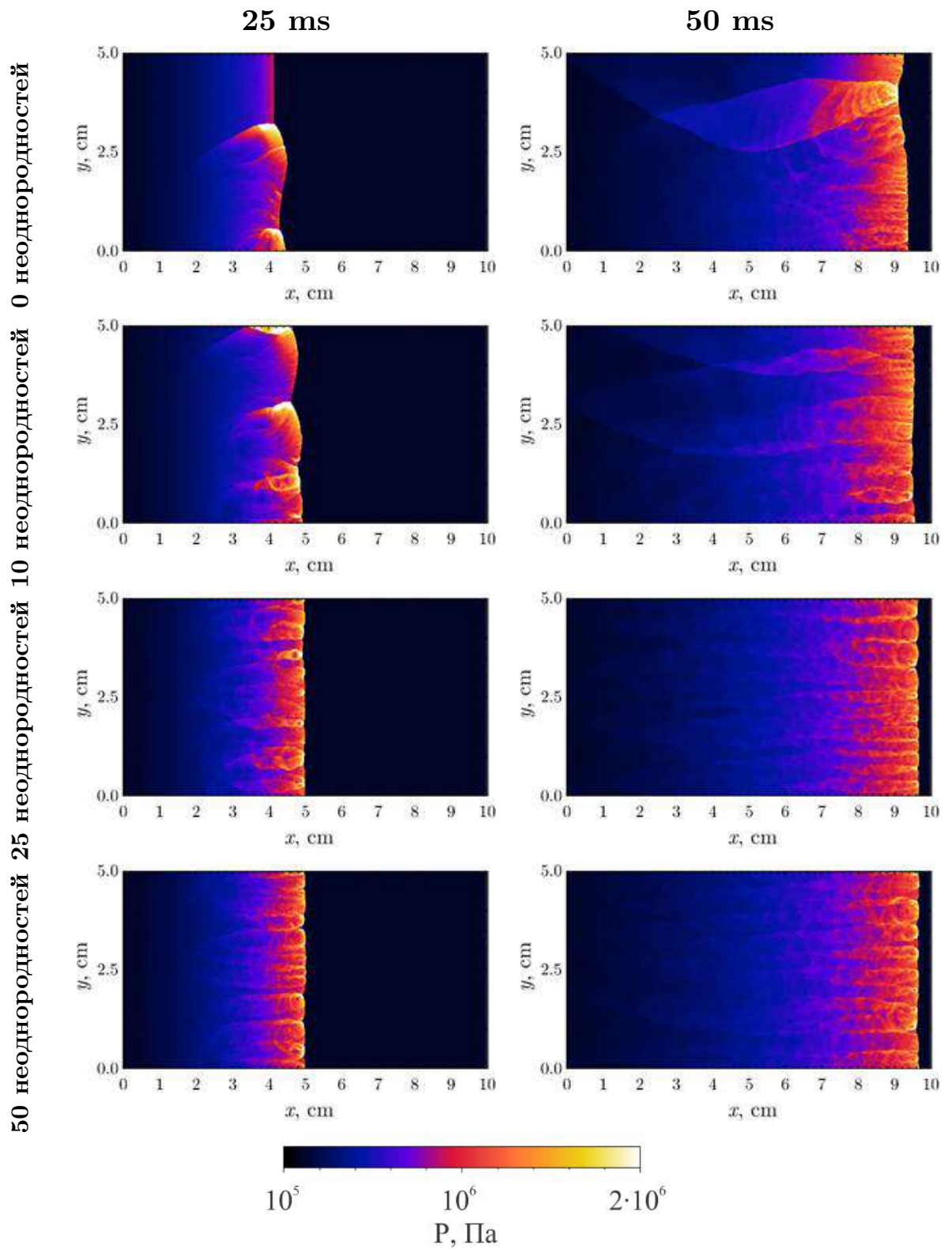


Рисунок 2.17 — Поле температуры при различной начальной температуре смеси в моменты времени 25 мкс и 50мкс

гия выделяется во всей области зажигания, а поперечный размер зона зажигания меньше поперечного размера канала на 0.5 см и она смещена относительно оси. Т.к. поперечник зоны поджигания меньше поперечного сечения канала и зона зажигания расположена не симметрично относительно оси канала. Заметим, что при большом количестве первичных неоднородностей их распределение по области зажигания становится более равномерным. Более того, чем больше исходных неоднородностей, тем равномернее происходит инициирования осцилляций и они меньше по масштабу. В случае же нулевого числа первичных неоднородностей случайная осцилляция решения, появившаяся за счет ошибок округления при расчете, развивается без взаимодействия с прочими осцилляциями, что в условиях принципиальной неустойчивости плоского детонационного фронта приводит ее к значительному усилению. Лишь после того, как первичная осцилляция провзаимодействует со всем фронтом (поперечные волны, ей порождаемые, охватят весь фронт детонации), решение придет к состоянию, близкому к тому, которое получается при большем числе первичных неоднородностей.

На рисунке 2.18 представлено распределение максимальных значений давления в точках области за фронтом волны детонации, зафиксированных к моменту 50 мкс для нескольких значений числа подзон энергоподвода и одинаковых прочих условиях.

Рисунок 2.18 показывает, что при нулевом числе неоднородностей возникновение первичных осцилляций развивалось, видимо, за счет неточностей аппроксимации численной схемы, из двух источников, сильного в нижней части домена и слабого в верхней части

На рисунке 2.19 для сравнения представлены профили среднего по сечению давления для различного числа зон энергоподвода при прочих равных условиях и величины давления Чепмена-Жуге и в пике Неймана.

Из рисунка 2.19 видно, что с ростом числа зон энергоподвода среднее давление в пике Неймана увеличивается, и увеличение наиболее заметно для момента времени 25 мкс. Для времени 50 мкс эта разница уже не столь велика, хотя кривая, соответствующая нулевому числу неоднородностей, отстает от других. Повышенное же значение среднего давления при большом числе неоднородности свидетельствует о большей равномерности осцилляций. Следует заметить, что поле давления (рисунок 2.17), распределение

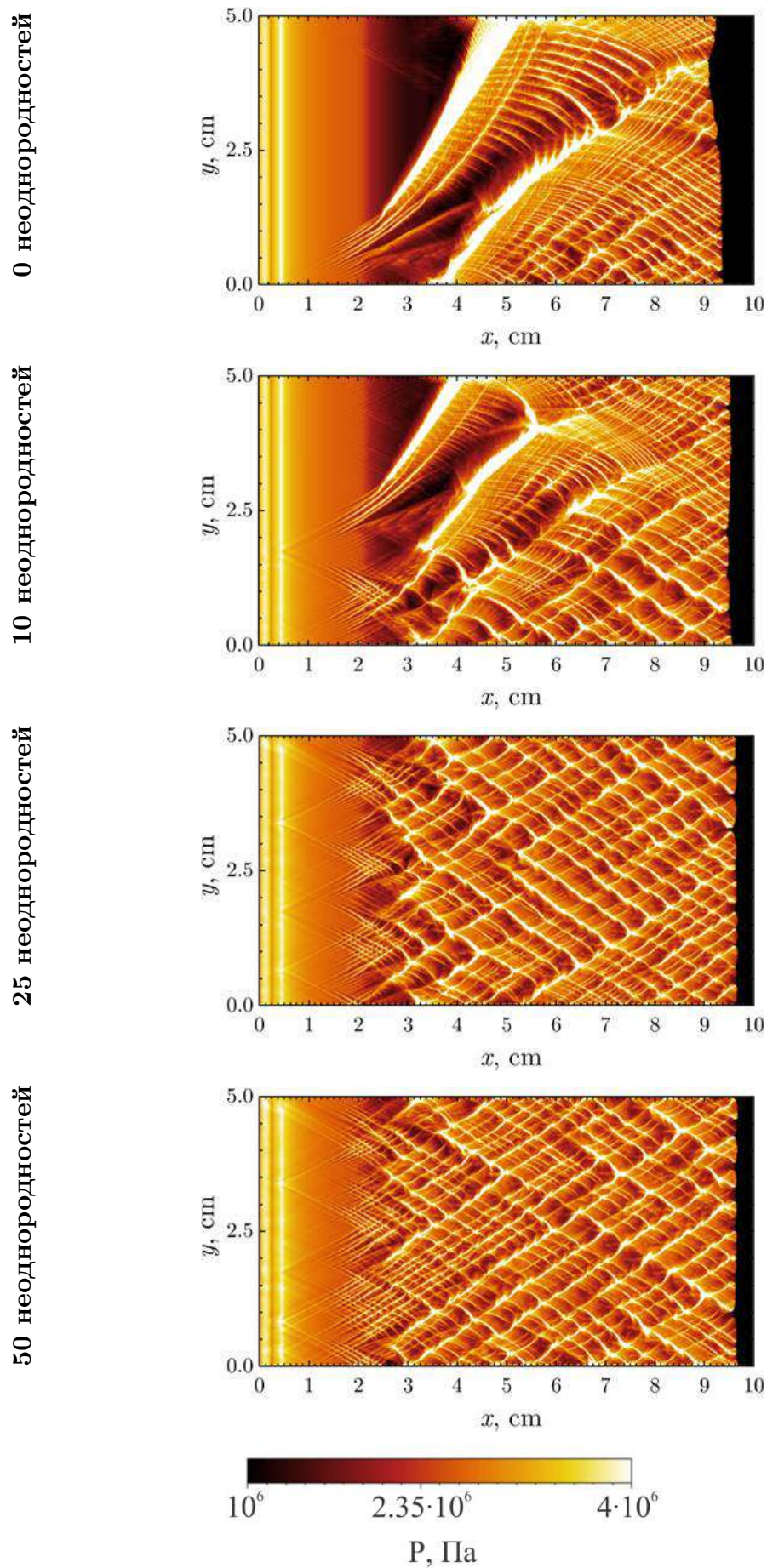


Рисунок 2.18 — Распределение максимальных значений давления в точках области за фронтом волны детонации, зафиксированных к моменту 50 мкс для нескольких значений числа подзон энергододвода.

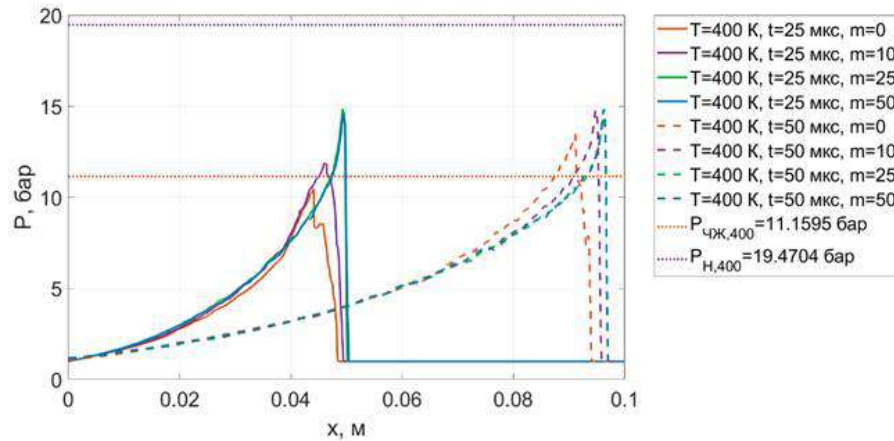


Рисунок 2.19 — Среднее по сечению давление, давление Чепмена – Жуге и давление в пике Неймана в области для случаев с различным числом зон энергоподвода.

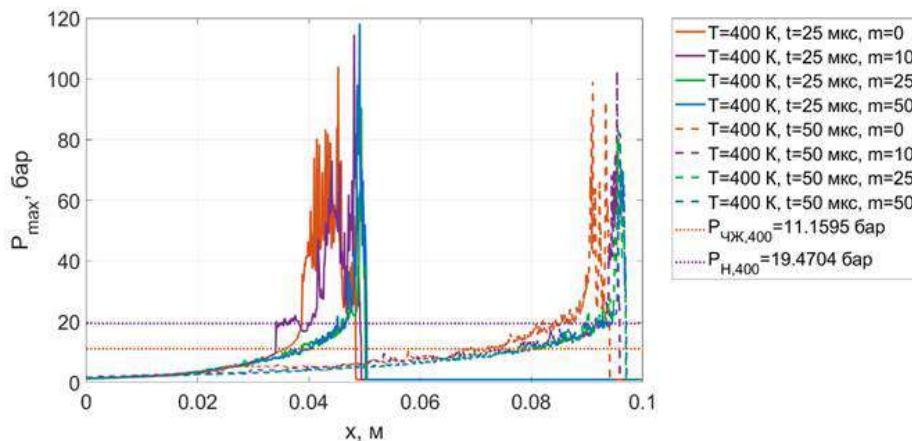


Рисунок 2.20 — Максимальное по сечению значение давления, давление Чепмена – Жуге и давление в пике Неймана для случаев с различным числом зон энергоподвода для моментов времени 25 и 50 мкс.

максимальных значений давления (рисунок 2.18) и среднее значение расчетного давления (рисунок 2.19) практически одинаковы при 25 и 50 зонах энергоподвода. Кроме того, пик среднего давления выше давления Чепмена – Жуге, но ниже значения пика Неймана в момент времени 50 мкс независимо от числа зон энергоподвода. В момент времени 25 мкс это так лишь при большом числе зон энергоподвода, а при малом числе пик среднего по сечению давления ниже давления Чепмена – Жуге, и тем более давления в пике Неймана.

На рисунке 2.19 изображено максимальное по сечению значение давления, давление Чепмена – Жуге и давление в пике Неймана для случаев с различным числом зон энергоподвода для моментов времени 25 и 50 мкс.

Из рисунка 2.20 видно, что максимум по сечению давления получается в момент времени 25 мкс, причем при большом, а не малом числе зон энергоподвода, хотя во всех случаях он многократно превышает как давление Чепмена – Жуге, так и давление в пике Неймана. В то же время, при малом числе зон энергоподвода область максимума значительно шире, что связано с большим числом изломов фронта волны детонации в момент времени 25 мкс. То, что в момент времени 50 мкс максимум давления наибольший при десяти зонах энергоподвода, возможно связано с появлением к этому времени случайных осцилляций максимального давления. Средний размер ячейки составил 0.42 см по результатам расчетов длинном канале с указанным ранее числом зон энергоподвода при начальной температуре смеси $T = 400$ К.

2.3.4 Результаты численного исследования с периодическим граничным условием

Напомним, что описанный в начале раздела (2.26) как третий, вариант граничных условий, называемый периодическим граничным условием, задается только на боковых стенках канала, чтобы смоделировать трехмерное течение в узком зазоре между двумя коаксиальными цилиндрами в двумерной постановке. При этом канал представляет собой плоскую развертку цилиндрической поверхности, разрезанной по линии вдоль оси цилиндра, а боковые стенки канала являются краями разреза.

Работоспособность периодических граничных условий была протестирована расчетами, в которых энергоподвод происходил не на всей площади зоны зажигания (см. рисунок 2.4) вблизи левого края, а на ее части, смещенной относительно оси канала, что бы после достижения какой-либо волной боковой стенки она бы появилась, не отразившись, с противоположной границы так, как если бы граница вообще не существовала, а вместо нее была бы склейка. Для описания горения использовались два кинетических механизма из работ [197] и [198] для подсистемы горения водорода Приложение А.6. Выбранные кинетические механизмы, как будет показано,



Рисунок 2.21 — Схема постановки задачи с периодическими граничными условиями.

дают размеры детонационной ячейки наиболее близкие к экспериментальным данным.

Далее представлены результаты исследования ячеистой детонации, проведенного с использованием шести кинетических механизмов, рассмотренных в параграфе 2.2, для случая периодических граничных условий на стенках канала при начальной температуре стехиометрической водородно-воздушной смеси $T_0 = 500$ К и начальном давлении $P_0 = 1$ бар. Схема канала с указанием его размеров и положения зоны зажигания приведена на рисунке 2.21. Интенсивность источника энергии зажигания и время его действия были теми же, что и ранее.

На рисунке 2.22 представлены для сравнения распределения максимальных значений давления в точках канала, полученных к моменту окончания расчета для нескольких кинетических механизмов горения стехиометрической смеси водорода и воздуха: (а) GRI Mech 3.0 [199] (1999); (б) У. Мааса [200] (1992); (в) Ли-Джао-Казаков-Драер [201] (2004); (г); Ф. Вильямса [202] (2004) (д) З. Хонга [197] (2010); (е) группы А.М. Терезы [198] (2019).

В таблице 2 приведены данные для сравнения размеров ячеек, полученных в экспериментах, с размерами, полученными численно с использованием нескольких кинетических механизмов.

Как видно из таблицы 2, наилучшее совпадение с экспериментами дают кинетический механизм [198], который немного завышает размер экспериментальной ячейки, и кинетический механизм [197], который немного занижает размер ячейки. Все остальные механизмы существенно занижают размер детонационной ячейки.

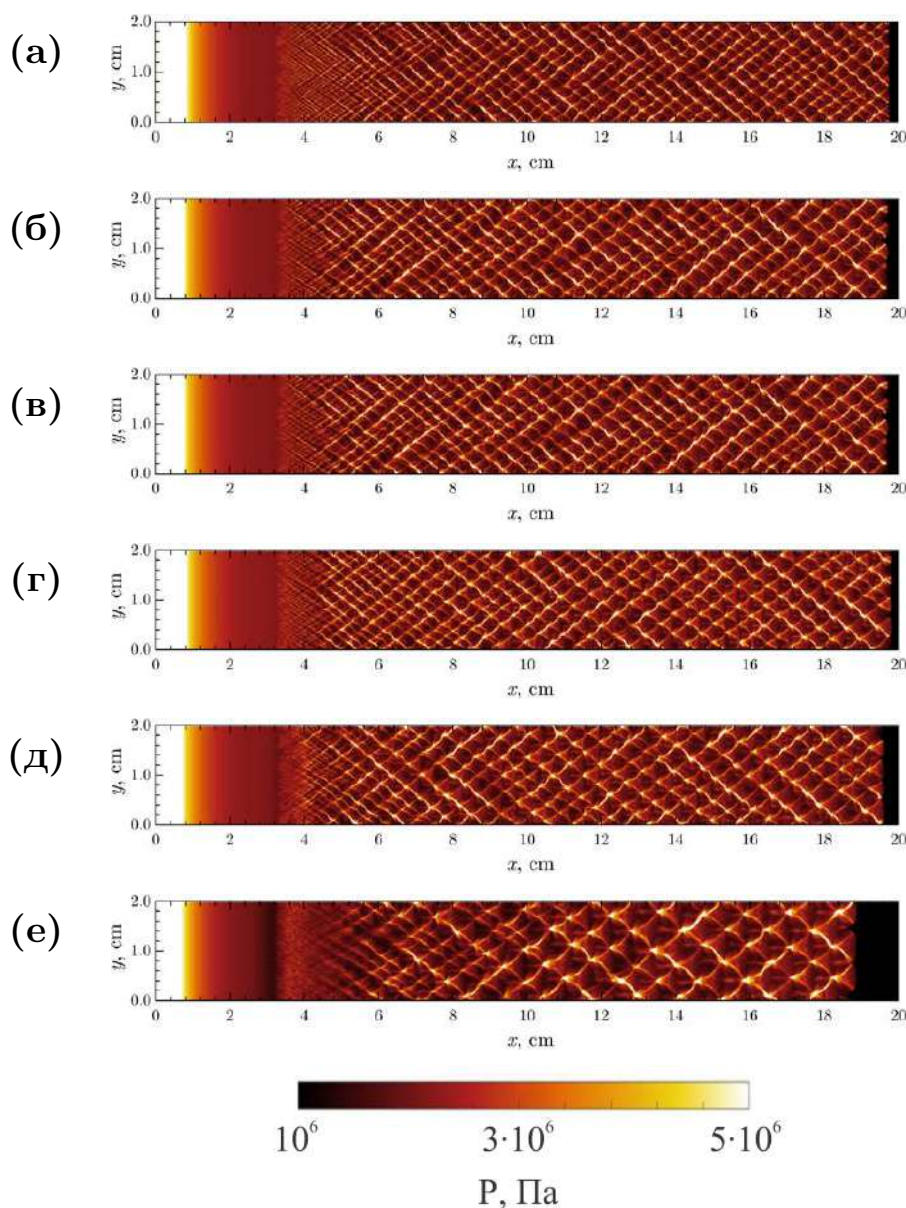


Рисунок 2.22 — Сравнение распределений максимальных значений давления в точках канала, полученных к моменту окончания расчета для различных кинетических механизмов стехиометрической смеси водорода и воздуха: (а) GRI Mech 3.0 [199] (1999); (б) У. Мааса [200] (1992); (в) Ли-Джао-Казаков-Драер [201] (2004); (г); Ф. Вильямса [202] (2004) (д) З. Хонга [197] (2010); (е) группы А.М. Терезы [198] (2019).

Таблица 2 — Сравнение расчетных и экспериментальных значений размера детонационных ячеек.

Кинетический механизм	Размер детонационной ячейки (см)
Механизм У. Мааса [200] (1992)	0.31
Механизм GRI Mech 3.0 [199] (1999)	0.33
Механизм Ли-Джао-Казаков-Драер [201] (2004)	0.36
Механизм Ф. Вильямса [202] (2004)	0.40
Механизм З. Хонга [197] (2010)	0.44
Механизм группы А.М. Терезы [198] (2019)	0.67
Аппроксимация экспериментальных данных С. Дорофеева, (2000) [85]	0.63

Влияние ширины канала на размер детонационной ячейки

Для исследования влияния ширины канала на развитие ячеистой структуры детонации рассмотрим две начальные смеси ($[H_2]:[O_2]:[N_2]=2:1:4$) с температурой 450 К и 500 К для различной ширины канала: (а) 5 см; (б) 2 см; (в) 0.5 см; (г) 0.2 см. Длина канала составила 10 см для всех рассмотренных случаев. Начальное давление смеси 1 бар. В качестве кинетики использовался кинетический механизм [198].

На рисунке 2.23 представлено распределение максимальных значений давления в точках канала, полученных к моменту окончания расчета при начальной температуре 450 К (слева, размер детонационной ячейки 0.56 см) и 500 К (справа, размер детонационной ячейки 0.67 см) для нескольких значений ширины канала: (а) 5 см; (б) 2 см; (в) 0.5 см; (г) 0.2 см.

Согласно расчетам, среднее значение размера детонационной ячейки для смеси при температуре 450 К составило 0.56 см, а для температуре 500 К – 0.67 см. (За Среднее значение принимается величина равная сумме поперечных размеров полученное по ширине канала) Если толщин канала была меньше указанных размеров детонационной ячейки, то наблюдался режим детонации с одной тройной точкой и одной поперечной волной подобный спину. Согласно результатам работы [24; 128] в канале с непроницаемыми стенками получается половина ячейки, так как тройная точка двигается

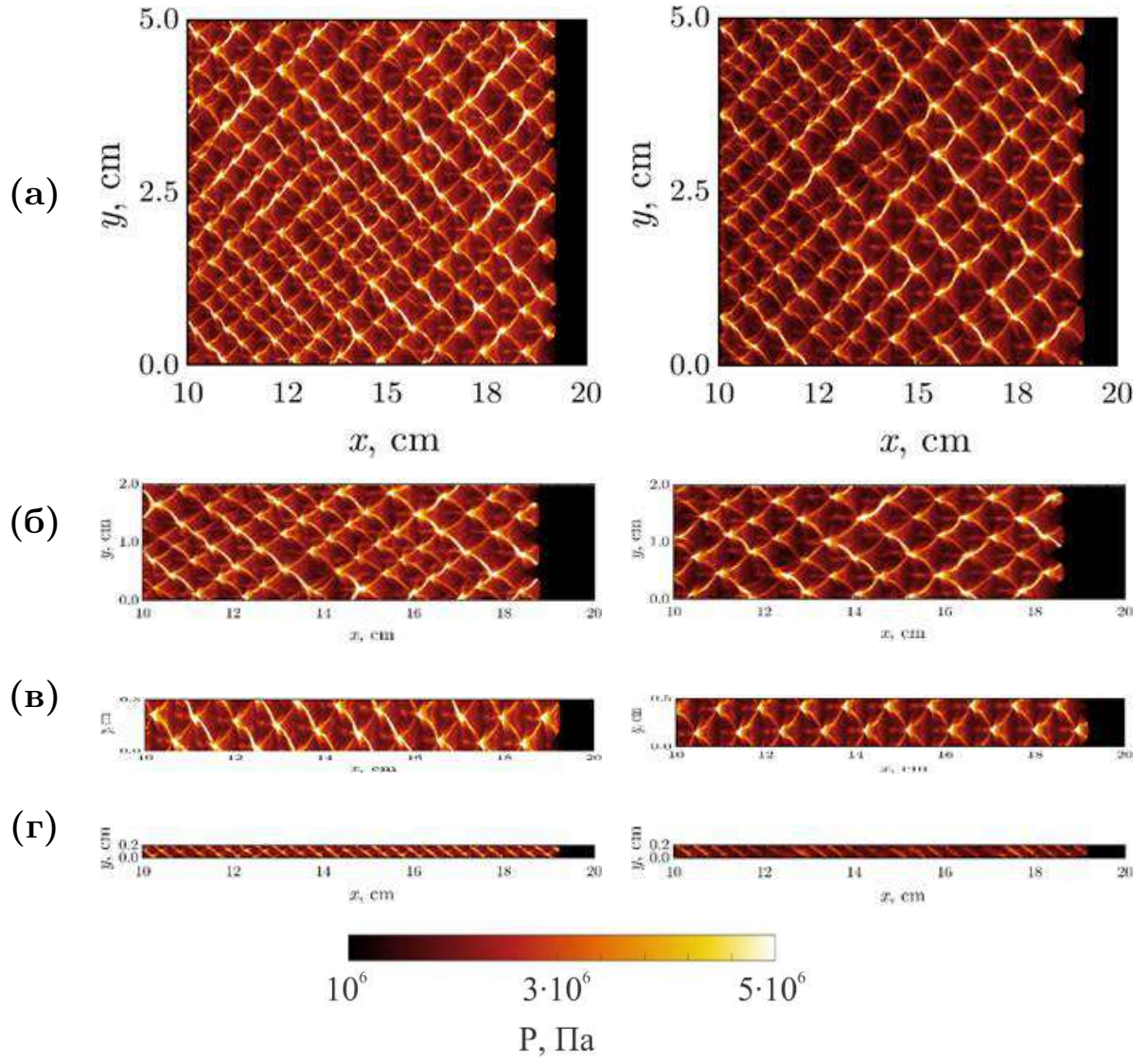


Рисунок 2.23 — Распределение максимальных значений давления в точках канала, полученных к моменту окончания расчета при начальной температуре 450 К (слева, размер детонационной ячейки 0.56 см) и 500 К (справа, размер детонационной ячейки 0.67 см) для нескольких значений ширины канала: (а) 5 см; (б) 2 см; (в) 0.5 см; (г) 0.2 см.

зигзагообразно, отражаясь то от верхней, то от нижней стенки канала. В той связи для обеих температур для толщины канала 0.5 см наблюдается два спина, идущих на встречу друг другу, наблюдается одна ячейка, но меньшего размера. В случае толщины 0.2 см для температуры 450 К наблюдается не два спина, а одна ячейка еще меньшего размера, для случая температуры 500 К – не один спин, а половина ячейки. Более подробно это можно рассмотреть на рисунке 2.24.

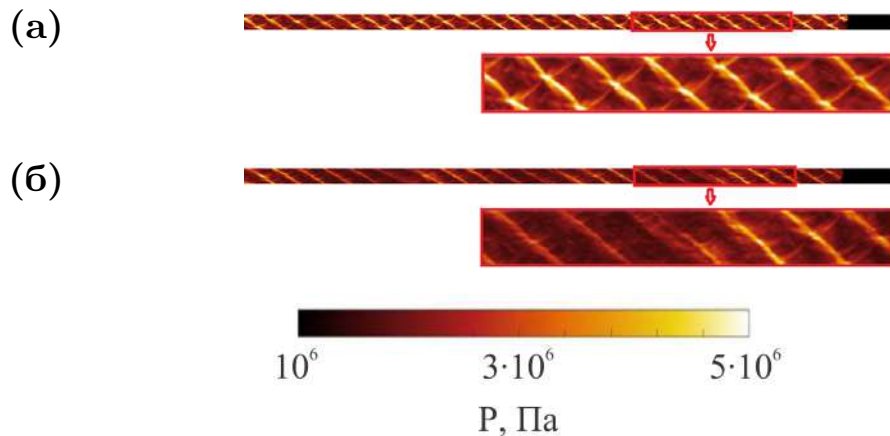


Рисунок 2.24 — Следы тройных точек в тонких каналах (0.2 см) с периодическими граничными условиями для начальной температуры: (а) 450 К и (б) 500 К. Кинетический механизм [198].

2.4 Выводы к первой главе

Расчет процесса распространения волны детонации с образованием ячеистой структуры рассмотрен в рамках двумерной плоской модели в прямоугольном канале с открытыми границами на концах канала и с закрытыми боковыми границами в поперечном направлении, также с периодическими граничными условиями. Характерный размер ячейки – в установившемся режиме определяется только свойствами смеси, а не условиями инициирования (“забывание” начальных условий). Наилучшее совпадение с экспериментами дает механизм Терезы А.М. (небольшое завышение размера ячейки: 0.67 см против 0.63 см в эксперименте). Остальные механизмы существенно занижают размер детонационной ячейки. При низкой температуре и высокой плотности наблюдается иерархия ячеек (мелкие

объединяются в крупные). Однако с ростом температуры расчётный размер ячейки увеличивается, что противоречит экспериментальным данным. Уменьшение ширины не сказывается на ячеистой структуре, пока ширина не становится сравнимой с размером ячейки. При дальнейшем сужении происходит переход в режим вращения (одна поперечная волна – детонационный спин), а при ещё меньшей ширине – затухание детонации (в расчётах без переноса – одномерный пульсирующий режим). Полученное затухание детонации при уменьшении канала ниже критической ширины качественно подтверждается экспериментами; модель корректно воспроизводит ячеистую структуру при высоких температурах.

Глава 3. ВЛИЯНИЕ УГЛЕВОДОРОДНОГО ИНГИБИТОРА НА РАЗВИТУЮ ДЕТОНАЦИЮ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ

Смеси водорода с воздухом очень чувствительны к воспламенению и могут загореться даже от разряда статического электричества, а распространяющаяся в результате этого волна нормального горения может спонтанно трансформироваться в волну детонации, которая способна вызывать разрушения устройств, сооружений и привести к гибели людей. Существует множество способов управления детонацией, в смысле, недопущения, ослабления и подавления этого взрывного процесса, называемого просто взрывом из-за его скоротечности. Предотвращение взрыва обеспечивается, прежде всего, защитой емкостей от неконтролируемых выбросов водорода, а также устранением возможных источников теплового или ударного воздействия на горючую смесь. Поскольку катастрофы связаны с воздействием волн детонации, то в пространстве, где возможно распространение волн нормального горения, должны применяться методы пожаротушения и предотвращения его трансформации в детонацию. Для ослабления и подавления сформировавшейся волны детонации широко используются механические барьеры и волнопоглощающие покрытия стенок каналов и труб. В последнее время внимание и усилия многих специалистов направлены на исследование химических методов ослабления и подавления детонации.

Настоящая глава посвящена исследованию методом виртуального эксперимента возможности и эффективности применения для этих целей ингибиторов в водородно-воздушных смесях. Дается анализ базового физико-химического принципа подавления детонации за счет радикального обрыва цепных реакций в присутствии ингибитора. Проводится численное исследование зависимости эффективности воздействия ингибитора как контролирующего фактора от условий формирования и распространения детонации. С использованием расширенного и сокращенного вариантов кинетического механизма определены концентрационные пределы детонации при наличии в смеси ингибитора. Проведенное сравнение кинетических механизмов, позволяющее оценить адекватность применения сокращен-

ных моделей для инженерных расчетов, направленных на обеспечение взрывобезопасности объектов, использующих водородные технологии. В результате проведенных исследований установлены количественные закономерности влияния углеводородной добавки в качестве ингибитора на динамику и структуру детонационной волны. Результаты данной главы опубликованы в статьях [I; V].

3.1 Химический механизм воздействия ингибитора на детонацию

Химическая реакция водорода с кислородом – классический пример разветвленной цепной реакции. В цепных реакциях важнейшую роль играют радикалы как промежуточные продукты элементарных стадий. Без посредства радикалов конечный продукт не образуется. В реакции H_2 и O_2 наиболее подвижным и активным радикалом является атомарный водород H . Если снизить его активность при помощи химической добавки, реакция замедлится. Замедление реакции совсем не означает снижение ее энергетики. Снижения активности H можно добиться многими способами, один из которых – присоединение к непредельному углеводороду с ликвидацией двойной связи между атомами углерода. Образующийся радикал алканового ряда значительно менее активен атомарного водорода. В настоящем исследовании в роли ингибитора выступает пропилен C_3H_6 , или $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_3$. Присоединение к нему атомарного водорода дает два варианта радикала ($\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ и $\text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_3$). С наибольшей вероятностью образуется второй из них.

Свойство детонации быть самоподдерживающейся во многом определяется временем задержки тепловыделения, которое определяется временем развития цепного процесса. Изъятие H из цепного процесса (частичное) замедляет реакцию и приводит к переходу первично развившейся детонации в режим горения [50].

3.2 Математическое моделирование процесса ингибирования детонации

Для описания реагирующих течений смесей в присутствии ингибитора используется система уравнений многокомпонентной газовой динамики с учетом химических превращений, вязкости, теплопроводности и диффузии. Она состоит из уравнений баланса массы, импульса и энергии:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_k u_j) - \frac{\partial J_{k,j}}{\partial x_j} = \dot{\omega}_k \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{i,j}}{\partial x_j} = 0 \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial E_T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} ((E_T + p) u_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} (-J_{T,j} + u_i \tau_{i,j}) = \dot{Q} \quad (3.3)$$

Поскольку в уравнениях (3.1) – (3.3) учитываются эффекты переноса, то необходимо на неподвижных непроницаемых стенках выставить условия соответствующие данной системе уравнений: условие прилипания, т.е. равенство нулю тангенциальной и нормальной скорости газа скорости и условие адиабатичности - равенству нулю градиента температуры, и условие равенства нулю градиентов концентраций компонентов смеси. диффузии.

В этой системе, ρ_k – парциальная плотность компонента k , $J_{k,j}$ компоненты вектора диффузионного потока компонента k , $\dot{\omega}_k$ интенсивность образования компонента k в химических реакциях, ρ плотность газовой смеси, u_j компонента вектора скорости газа, p давление смеси, $\tau_{i,j}$ компоненты девиатора тензора напряжений, E_T полная внутренняя энергия единицы объема газа: сумма тепловой, химической, кинетической и турбулентной энергии, $J_{T,j}$ компоненты вектора потока тепловой и химической энергии, $\dot{Q}$ интенсивность притока тепловой энергии из внешнего источника, без учета энергии, поступающей с добавляемой массой. Индекс k пробегает значения $1 \dots N_C$, индексы i, j значения $1, 2, 3$; по повторяющимся индексам ведется суммирование.

Плотность, массовая доля компонента, молярная плотность и молярная масса выражаются следующими соотношениями:

$$\begin{aligned}\rho &= \sum_{k=1}^{N_C} \rho_k \\ Y_k &= \frac{\rho_k}{\rho} \\ X_k &= \frac{\rho_k}{W_k}\end{aligned}\tag{3.4}$$

Здесь Y_k массовая концентрация компонента k , X_k молярная плотность, W_k масса моля компонента.

Давление определяется как:

$$p = R_G T \sum_{k=1}^{N_C} X_k \tag{3.5}$$

Энергия определяется как:

$$\begin{aligned}E_T &= E + \rho \frac{u^2}{2} \\ u^2 &= u_j u_j \\ E &= \sum_{k=1}^{N_C} X_k E_k(T) = R_G T \sum_{k=1}^{N_C} X_k \cdot \left(\hat{H}_k(T) - 1 \right)\end{aligned}\tag{3.6}$$

Здесь E_k - внутренняя энергия на моль вещества, $\hat{H}_k(T)$ энтальпия вещества, содержащая энтальпию образования при эталонной температуре T_{ref} (химическая энергия). Эти функции являются основой термодинамического описания компонентов смеси. Для многих компонентов они либо сведены в таблицу, либо аппроксимированы полиномами. Данные о них и формат данных описаны в руководствах [193] и [205].

Согласно закону действующих масс интенсивность образования компонента смеси в результате химических превращений может быть выражена в терминах скорости каждой реакции. Данные по всем реакциям кинетического механизма суммируются, так что в итоге расчет сводится к следующему выражению, где интенсивность образования k -ого компонента определяется как:

$$\dot{\omega}_k = W_k \sum_{r=1}^{N_R} (\nu''_{rk} - \nu'_{rk}) f_r(T, M_r) \left[\prod_{k=1}^{N_C} X_k^{\nu'_{rk}} - \frac{\theta_r}{K_r(T)} \prod_{k=1}^{N_C} X_k^{\nu''_{rk}} \right] \tag{3.7}$$

Здесь ν'_{rk} , ν''_{rk} – входящие и исходящие стехиометрические коэффициенты реакции, ω_r – скорость (интенсивность) реакции, зависящая от температуры и парциальных плотностей компонентов, f_r – коэффициент скорости прямой реакции, зависящий от температуры и обобщенной молярной плотности смеси, X_k – молярная плотность компонента, θ_r – признак обратимости реакции: если 0, то реакция необратима, K_r – константа равновесия реакции. Молярная плотность компонента пропорциональна его парциальной плотности, а обобщенная молярная плотность суммирует эти значения с весом, зависящим от конкретной реакции:

$$M_r = \sum_{k=1}^{N_C} \gamma_{rk} X_k \quad (3.8)$$

Компоненты тензора вязких напряжений имеют вид:

$$\tau_{i,j} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_s}{\partial x_s} \delta_{i,j} \right) \quad (3.9)$$

Здесь:

$$\mu = \sum_{k=1}^{N_C} \frac{k \mu_k}{k + \sum_{j \neq k}^{N_C} C_j \varphi_{k,j}} \quad (3.10)$$

$$C_k = \frac{X_k}{\sum_{j=1}^{N_C} X_j} \quad (3.11)$$

C_k – молярная концентрация k -ого компонента. Формула 3.10 показывает, что эффективная вязкость смеси ниже средневзвешенной из-за коэффициентов взаимности. Формула для вычисления коэффициентов взаимности взята из работы [206]. Она не содержит эмпирических констант, они берутся из кинетической теории:

$$\varphi_{k,j} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{W_k}{W_j} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 + \left(\frac{\mu_k}{\mu_j} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{W_j}{W_k} \right)^{\frac{1}{4}} \right)^2 \quad (3.12)$$

Молекулярная вязкость рассчитывается с использованием физических молекулярных констант: массы, эффективного диаметра столкновения, параметров потенциала Леннарда-Джонса, дипольного момента, с использованием потенциала Штокмайера, а затем интерполируется с помощью

простого выражения для данного интервала. Можно приближенно рассчитать коэффициент динамический вязкости газа с неполярными молекулами, находящегося под умеренным давлением [207]:

$$\mu_k = 266.93 \cdot 10^{-7} \frac{\sqrt{W_k T}}{\sigma_k^2 \Omega_V} \quad (3.13)$$

где μ_k – коэффициент динамической вязкости; Ω_V – безразмерный интеграл столкновений для переноса импульса (функция характеристической безразмерной температуры $T_k^* = k_b T / \varepsilon_k$); k_b – постоянная Больцмана; ε_k / k_b – параметр потенциальной функции межмолекулярного взаимодействия; σ_k – диаметр столкновений.

Табличные значения величин ε_k / k_b и σ_k для большого числа компонентов приведены, например, в [207; 208]. Ω_V , согласно П. Нойфельду [209], определяется как:

$$\Omega_V = \frac{1.16145}{T_k^{*0.14874}} + \frac{0.52487}{e^{0.7732 \cdot T_k^*}} + \frac{2.16178}{e^{2.43787 \cdot T_k^*}} \quad (3.14)$$

Для определения компонент вектора потока тепла используется соотношение:

$$J_{T,j} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^{N_c} h_k J_{k,j} \quad (3.15)$$

$$h_k = \frac{R_G T \hat{H}_k(T)}{W_k} \quad (3.16)$$

В этих выражениях: λ – коэффициент теплопроводности, энтальпии моля компонента на единицу объёма (определяется моделью термодинамики компоненты), h_k – энтальпия моля компонента на единицу массы.

Значения коэффициента теплопроводности, подобно значениям коэффициента вязкости, можно рассчитать согласно кинетической теории газов. Гиршфельдер, Берд и Кертисс [207] получили выражение для многоатомных газов с поправкой Эйкена, в котором учитывается передача энергии между поступательными и внутренними степенями свободы молекул, вида:

$$\lambda_k = \frac{15}{4} \frac{R}{W_k} \mu_k \left(\frac{4}{15} \frac{C_{V_k}}{R} + \frac{3}{5} \right) \quad (3.17)$$

где λ_k – коэффициент теплопроводности k -го компонента, а C_{V_k} – молярная теплоемкость k -ого компонента при постоянном объеме.

Для определения коэффициента теплопроводности смеси используется эмпирическое выражение из работы [210].

$$\lambda = \sum_{k=1}^N \frac{C_k \lambda_k}{\sum_{\substack{i=1 \\ j \neq i}}^N C_k A_{kj}} \quad (3.18)$$

$$A_{kj} = m \frac{\left[1 + \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_j} \right)^{1/2} \left(\frac{W_k}{W_j} \right)^{1/4} \right]^2}{\left[8 \left(1 + \frac{W_k}{W_j} \right) \right]^{1/2}} \quad (3.19)$$

Молярная теплоемкость при постоянном объеме, так же как и энтальпия, является основой термодинамического описания компонентов смеси. Методика ее расчета берется из работ [193; 195; 205]. Для компонент вектора диффузионного потока используется соотношение:

$$J_{k,j} = -(\rho D_k) \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad (3.20)$$

Здесь: D_k - коэффициент диффузии k -ого компонента, вычисляющийся на основе состава смеси и бинарных коэффициентов диффузии.

Для его расчета используется упрощенная формула Вильке [211]:

$$D_k = \frac{1 - C_k}{\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{N_c} \frac{C_j}{D_{jk}}} \quad (3.21)$$

Здесь: D_{jk} - коэффициент бинарной диффузии системы компонентов j - k , C_k - мольные доли компонентов смеси. Коэффициент бинарной диффузии согласно кинетической теории газов определяется выражением.

$$D_{jk} = 0.002628 \frac{\sqrt{T^3(W_j + W_k)/2W_j W_k}}{P \sigma_{jk}^2 \Omega_D} \quad (3.22)$$

Здесь: Ω_D - интеграл столкновений для переноса масс, зависящий от характеристической температуры:

$$\begin{aligned} T_{jk}^* &= kT / \varepsilon_{jk} \\ \sigma_{jk} &= \frac{\sigma_j + \sigma_k}{2} \\ \varepsilon_{jk} &= \sqrt{\varepsilon_j \varepsilon_k} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Эффективный коэффициент диффузии компонента характеризует скорость молекулярного переноса рассматриваемого компонента при конкретных условиях и зависит от коэффициентов бинарной диффузии каждой пары компонентов, а также от состава смеси. Для Ω_D используется формула, предложенная в работе П. Нойфельда [209]:

$$\Omega_D = \frac{1.06036}{T_{jk}^* 0.15610} + \frac{0.193}{e^{0.47635 \cdot T_{jk}^*}} + \frac{1.03587}{e^{1.52996 \cdot T_{jk}^*}} + \frac{1.76474}{e^{3.89411 \cdot T_{jk}^*}} \quad (3.24)$$

Однако для характеристики локальных явлений в многокомпонентных системах важным является не только представление о взаимодействии отдельных компонентов, но и общая картина поведения системы. Согласно Гиршфельдеру, Кертиссу и Берду [207], динамическая вязкость однокомпонентной системы прямо пропорциональна связана с её коэффициентом самодиффузии D_{kk} следующим соотношением:

$$D_{kk} = \frac{\mu_k}{\rho_k} \frac{6}{5} \frac{\Omega_V}{\Omega_D} \quad (3.25)$$

3.3 Постановка задачи о детонации в плоском канале

Численное исследование процесса инициирования детонации в газовых смесях показало, какую важную роль в нем играют эффекты переноса [212]. Так как инициирование детонации моделируется подводом достаточного для ее формирования энергии мгновенно или в течение короткого промежутка времени, то возникают вопросы о допустимости пренебречь влиянием процессов переноса, например, при расчете минимальной, называемой критической, энергии инициирования, или при численном исследовании ячеистой детонации. Для ответа на эти и другие вопросы были проведены сравнительные расчеты течений без учета и с учетом процессов переноса в задаче об инициировании и формировании ячеистой детонации в канале с непроницаемыми боковыми и открытыми торцевыми стенками. Соответствующая схема расчетной области представлена на рис. 3.1.

В начальном состоянии области I_1 и I_0 заполнены неподвижной водородно-воздушной смесью с заданными давлением P_0 , температурой T_0 и

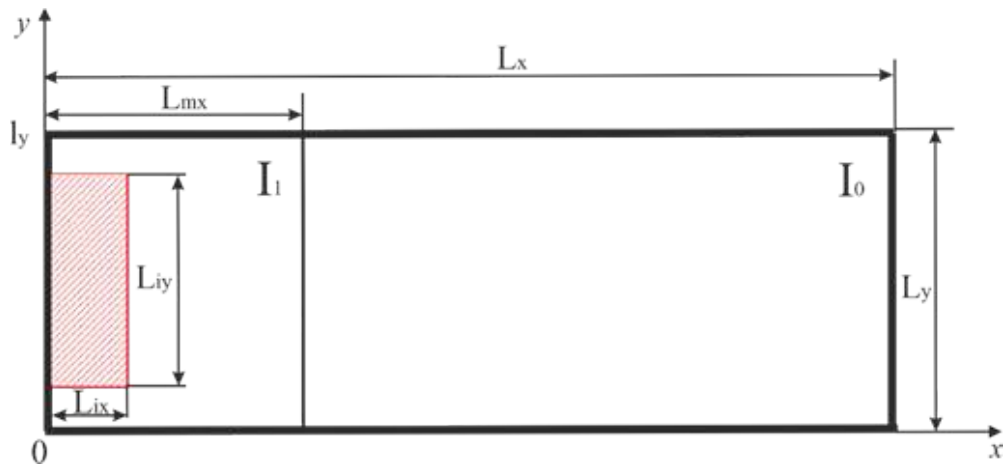


Рисунок 3.1 — Схема постановки задачи с периодическими граничными условиями.

отношением молярных плотностей (ненормированные молярные доли C_k): $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[H_2O]$. Чтобы получить из этих величин молярные плотности компонентов, используется формула (2.8).

Расчеты проводились при следующих значениях линейных размеров расчетной области: $L_x = 5$ см, $L_y = 2$ см, $L_{mx} = 2$ см, $L_{ix} = 0.25$ см, $L_{iy} = 1$ см. Для инициирования детонации в область у левой границы шириной 0.25 см и длиной 1 см подводилась энергия внешним источником мощности $Q = 20$ МВт/см³ в течении 1 мкс. В результате чего общее количество энергии на 1 см глубины области составило 25 Дж. Величина Q опреляется согласно формуле (2.31) второй главы. На верхней и нижней границах расчетной области ставилось условие прилипания, а на правой и левой – условие открытой границы.

Для численного исследования использовалась оригинальная программа, написанная на языке C стандарта ISO 89, которая не связана с конкретной операционной системой. В ней используется система распараллеливания OpenMP с соответствующими библиотеками работы с нитями исполнения. Детали реализации численного алгоритма представлены в Приложении A.1.

В расчетах использовался кинетический механизм из работы [198], подсистема горения водорода, и равномерная расчетная сетка из квадратных элементов размером 25 мкм, что соответствует значению 4000x400 ячеек для расчетной области. Размер расчетной ячейки подбирался так, чтобы разрешалась зона химических реакций (20 ячеек на зону).

Расчеты проводились для стехиометрической смеси состава: $[\text{H}_2]:[\text{O}_2]:[\text{N}_2] = 2:1:4$ при начальном давлении $p_0 = 1$ атм и температуре $T_0 = 500$ К.

На рисунке 3.2 для сравнения представлены распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках области на момент времени 55 мкс при начальной температуре смеси 500 К для случаев без учета (а) и с учетом (б) процессов переноса. Хорошо видно, что ячеистая структура детонации в рассмотренных случаях практически одинакова, но при отсутствии диффузии, вязкости и теплопроводности она более четкая, о чем свидетельствуют участки с наибольшим давлением. Другими словами, если учитывать эффекты переноса, структура ячейки получается более размытой, но размер ячейки остается прежним.

На рис. 3.2а и 3.2б можно увидеть тонкую структуру ячеистой детонации, которая свидетельствует о том, что поперечные детонационные волны, распространяющиеся за головным ударным фронтом сами имеют ячеистую структуру. Это явление было впервые обнаружено в экспериментах по вращающейся детонации [213] и получило название “спин на спине”.

3.4 Численное исследование задачи ингибирования детонации в стехиометрической смеси водорода с воздухом

В данном разделе численное исследование проводилось в области, представленной на рисунке 3.1, при следующих значениях ее линейных размеров: $L_x = 10$ см, $L_y = 2$ см, $L_{mx} = 2$ см, $L_{ix} = 0.25$ см, $L_{iy} = 2$ см. Для инициирования детонации в область у левой границы шириной 0.25 см и длиной 1 см подводилась энергия внешним источником мощности $Q = 20$ МВт/см³ в течении 1 мкс. На верхней и нижней границах расчетной области ставилось периодическое граничное условие, а на правой и левой – условие открытой границы.

В начальном состоянии области I_1 и I_0 заполнены неподвижной стехиометрической водородно-воздушной смесью состава: $[\text{H}_2]:[\text{O}_2]:[\text{N}_2]=2:1:4$ с добавкой в качестве ингибитора пропилена от 0 до 4% по объему при: $P_0 = 1$ атм, $T_0 = 400$ К или 500 К.

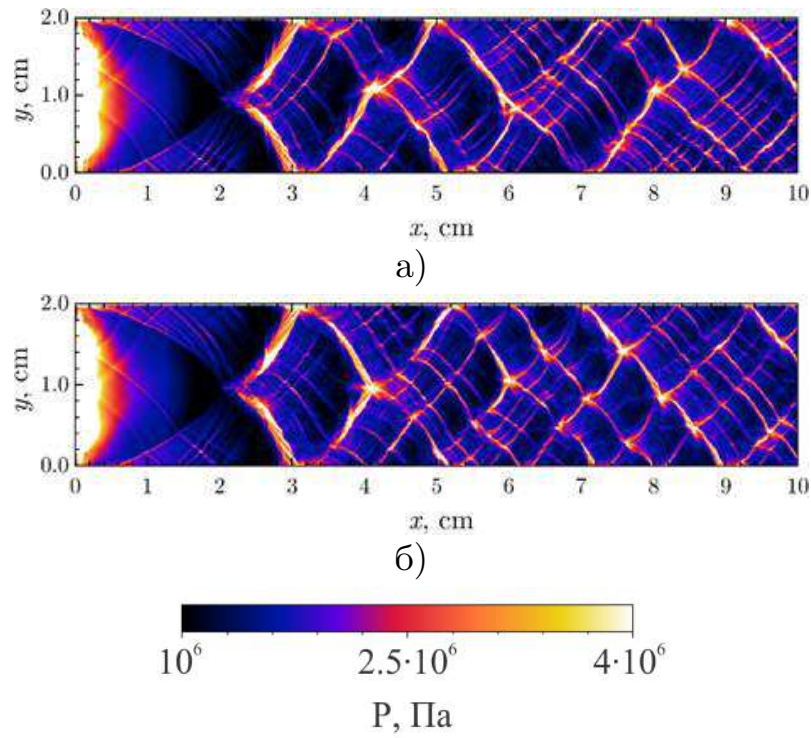


Рисунок 3.2 — Сравнение распределений максимальных значений давления, зафиксированных в точках области на момент времени 110 мкс при начальной температуре смеси 500 К для случаев без учета (а) и с учетом (б) процессов переноса.

В расчетах ячеистой детонации использовался кинетический механизм [197], содержащий 10 компонентов [H_2O ; OH ; H ; O ; Ar ; HO_2 ; H_2O_2 ; H_2 ; O_2 ; N_2] и 20 обратимых реакций. Может быть добавлен ингибитор C_3H_6 . Кинетика для ингибитора основана на реакции гидрирования, предложенной в монографии [50]:



Коэффициент скорости этой реакции:

$$f_{\text{C}_3\text{H}_6} = 1.13 \cdot 10^{13} \exp(-1640/R_G T) \quad (3.27)$$

где константа перед показателем степени имеет размерность $\text{см}^3/(\text{моль } \text{с})$, а энергия активации - кал/моль , в системе единиц СИ: $\text{м}^3/(\text{моль } \text{с})$ и 6860 Дж/моль , соответственно.

На рисунке 3.3 изображено поле давления а моменты времени 25 и 50 мкс при начальной температуре $T_0 = 400 \text{ К}$ для значений начальной

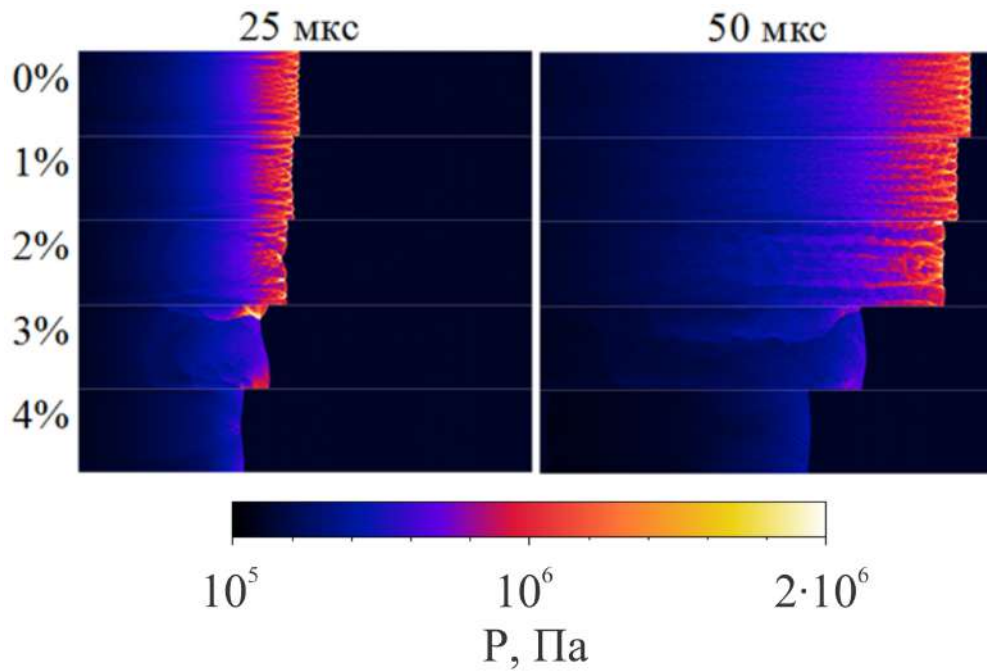


Рисунок 3.3 — Распределение давления в моменты времени 25 и 50 мкс при начальной температуре $T_0 = 400$ К для значений начальной концентрации пропилена 0, 1, 2, 3 и 4 процентов по объему.

концентрации пропилена 0, 1, 2, 3 и 4 процентов по объему. Из сравнения результатов видно, что в отсутствии пропилена по смеси распространяется самоподдерживающаяся ячеистая детонация. При 1% пропилена скорость волны незначительно снижается. При 2% пропилена неоднородности структуры детонационной волны становятся значительно крупнее. При 3% в момент 25 мкс видны две области высокого давления, одна у верхней, а другая у нижней границы расчетной области, которые склеены в силу периодического граничного условия и представляют собой одну неоднородность, которую можно считать головой спина, который к моменту времени 50 мкс уже выродился в ударную волну. При 4% уже к моменту 25 мкс детонационная волна выродилась в ударную, а к моменту 50 мкс интенсивность ударной волны снизилась. Следует отметить, что на всех рисунках давление у левой границы вследствие граничного условия свободного выхода падает. В следствии этого интенсивность ударной волны, идущей вправо, быстро ослабевает за счет приходящих от левого конца рабочей области волн разрежения.

На рисунке 3.4 изображено поле температуры в моменты времени 25 и 50 мкс при начальной температуре $T_0 = 400$ К для значений начальной концентрации пропилена 0, 1, 2, 3 и 4 процентов по объему. Для концентраций 0,

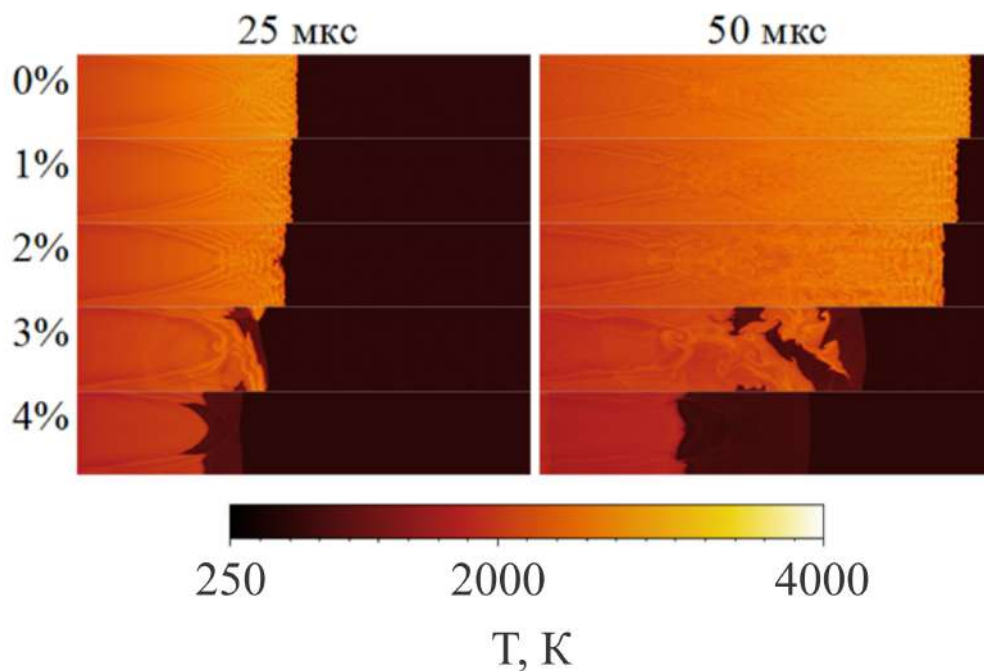


Рисунок 3.4 — Поле температуры для различной концентрации пропилена в моменты времени 25 и 50 мкс при начальной температуре 400 К

1 и 2 объемных процентов пропилена на рисунке 3.4 видна картина развитой ячеистой детонации с достаточно интенсивными неоднородностями температуры позади волны. но тем не менее везде температура сразу за волновой структурой достаточно высока, чтобы соответствовать температуре сгоревшей газовой смеси. Для концентрации 3% в момент времени 25 мкс область высокой температуры примыкает к лидирующей волне лишь в одном месте, разделенном на две части из-за периодического граничного условия, а в других местах ударная волна, заметная по меньшему подъему температуры, отходит вперед. Для 3% и в момент времени 50 мкс ударная волна уже везде опережает область высокой температуры, что говорит об отставании зоны реакции от лидирующей ударной волны. При концентрации 4% видно, что на лидирующей ударной волне температуры ниже температуры сгоревшего газа, поскольку он вызван адиабатическим нагревом в ударной волне. Видно, что область сгоревшего газа отстает от лидирующей ударной волны, и это отставание с течением времени увеличивается.

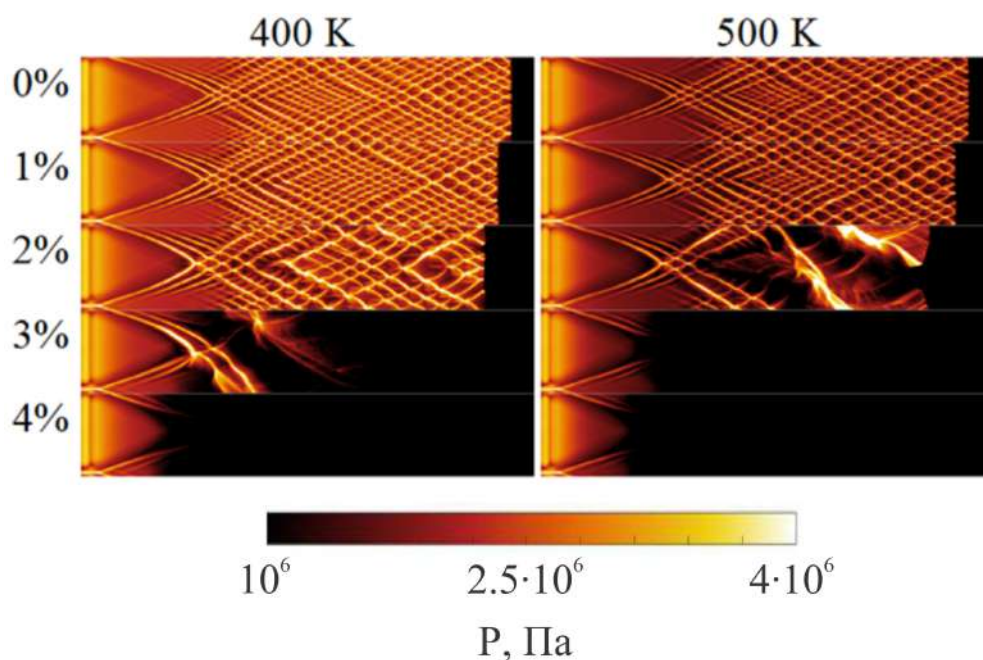


Рисунок 3.5 — Сравнение распределений максимальных значений давления, зафиксированных в точках области на момент времени 50 мкс при начальной температуре смеси 400 К (слева) и 500 К (справа) для концентраций пропилена от 0 до 4 объемных процентов с шагом в 1%.

3.4.1 Влияние начальной температуры на ингибирование детонации

На рисунке 3.5 представлено сравнение распределений максимальных значений давления, зафиксированных в точках области на момент времени 50 мкс при начальной температуре смеси 400 К (слева) и 500 К (справа) для концентраций пропилена от 0 до 4 объемных процентов с шагом в 1%.

На рисунке 3.5 во всех случаях у левой границы расчетной области видна зона продуктов детонации с высоким давлением, связанным с подводом большого количества энергии, необходимого для прямого инициирования детонации. Кроме того, хорошо видно, что во всех случаях инициирование детонации происходит за счет поперечных волн, формирующихся, когда поперечный размер зоны зажигания L_{iy} меньше поперечника расчетной области L_y и эта зона располагается симметрично относительно оси расчетной области (см. рисунок 3.1). При концентрации пропилена 4% детонация гаснет практически сразу при обеих начальных температурах смеси. При концентрации пропилена 3% и температуре 400 К детонация

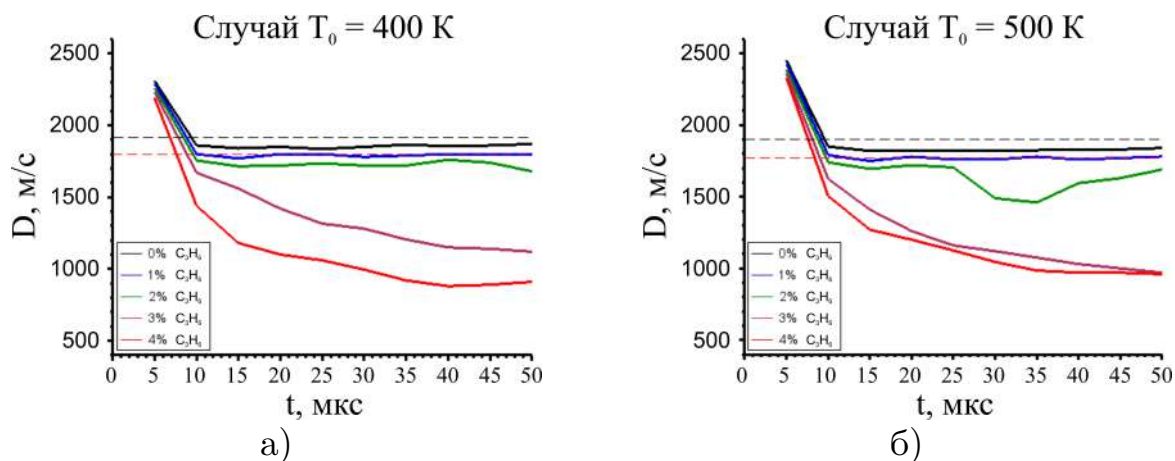


Рисунок 3.6 — Скорость лидирующей волны (детонации или ударной) в зависимости от времени для начальной температуры: а) 400 К, б) 500 К

трансформируется в спин, который практически сразу гаснет. Тогда как при температуре 500 К детонация гаснет практически сразу (как и при 4%). При концентрации пропилена 3% и температуре 400 К детонация не гаснет, хотя несколько укрупняется ее ячеистая структура, однако при температуре 500 К детонация трансформируется в спин, который гаснет, сделав полтора оборота. При концентрации пропилена 2% ячеистая детонация не гасится. Из рисунков хорошо видно, что при концентрации пропилена 1% скорость детонации практически не зависит от начальной температуры смеси и несколько меньше скорости без пропилена. Таким образом видно, что влияние ингибитора на подавление детонации тем сильнее, чем выше начальная температура смеси. Это можно объяснить тем, что интенсивность изъятия атомарного водорода из реакционной цепи растет с ростом температуры согласно формуле для коэффициента интенсивности скорости реакции (3.7).

На рисунке 3.6 представлена скорость ведущей волны (детонации или ударной) в зависимости от времени, начиная с 5 мкс и кончая 50 мкс, когда расчет заканчивался во всех случаях. Слева, на рисунке 3.6а, изображены кривые для различных начальных концентраций ингибитора и температуры 400 К, справа на рисунке 3.6б – то же, для температуры 500 К. Видно, что скорость ведущей волны с течением времени вначале падает, затем, колеблясь, становится для концентраций 0 и 1% несколько ниже уровня скорости Чепмена – Жуге (интервал скорости Чепмена – Жуге изображен штриховыми горизонтальными линиями). Для концентрации 2% при начальной температуре 400 К

В экспериментальных исследованиях В.В. Азатьяна и его сотрудников [50] выявлено, что добавка 2.5% объема пропилена подавляет развитую детонацию водородно-воздушной смеси. Это говорит о том, что данные численные исследования соответствуют экспериментальным.

3.4.2 Влияние условий формирования детонации на процесс ингибирования

В настоящем разделе, в отличие от предыдущего, где рассматривалось распространение ячеистой детонации по смеси, состоящей из водорода, кислорода и пропилена как ингибитора, предполагается, что область I_1 (рисунок 3.1) заполнена чистой стехиометрической водородно-кислородной или водородно-воздушной смесью, а в области I_0 находится стехиометрическая водородно-воздушная смесь, в которую добавлен пропилен.

Исследовалось течение в двух каналах, отличающихся линейными размерами. В первом канале: $L_x = 10$ см, $L_y = 2$ см, $L_{mx} = 2$ см, $L_{ix} = 0.2$ см, $L_{iy} = 1.6$ см, а во втором: $L_x = 15$ см, $L_y = 2$ см, $L_{mx} = 7$ см, $L_{ix} = 0.2$ см, $L_{iy} = 1.6$ см. Для обоих каналов на верхней и нижней границах расчетной области ставилось периодическое граничное условие, а на правой и левой – условие открытой границы. Для инициирования детонации в область у левой границы шириной 0.2 см и длиной 1.6 см подводилась энергия внешним источником мощности $Q = 20$ МВт/см³ в течении 1 мкс. В результате общее количество под энергии на 1 см глубины области составило 25 Дж. Область I_1 служит для формирования развитой ячеистой детонации в смеси без ингибитора, а в области I_0 находится исследуемая смесь, содержащая ингибитор, в которой в зависимости от количества ингибитора волна детонации может либо продолжить распространяться, либо трансформироваться в ударную волну.

В канале с размерами $L_x = 10$ см, $L_y = 2$ см в начальном состоянии область I_1 заполнена неподвижной стехиометрической водородно-кислородной смесью, а в канале с размерами $L_x = 15$ см, $L_y = 2$ см область I_1 заполнена неподвижной стехиометрической водородно-воздушной смесью.

В обоих каналах в областит I_0 находится неподвижная смесь водорода, воздуха и пропилена.

Целью исследования в первом канале является изучение воздействия интенсивной детонационной волны (с небольшими, еще не сформировавшимися ячейками) на смесь, в которую добавлен ингибитор, а во втором - изучение влияния ингибитора на динамику уже развившейся ячеистой детонации в исследуемой смеси.

В расчетах ячеистой детонации использовался кинетический механизм [198], который содержит 11 компонент [H_2O ; OH ; H ; O ; Ar ; HO_2 ; H_2O_2 ; H_2 ; O_2 ; N_2 ; OH^*] и 23 обратимых реакции. Причем компонент возбужденного гидроксила OH^* , который отвечает за люминесценцию вещества и позволяет регистрировать зону горения. Может быть добавлен ингибитор C_3H_6 . Кинетика для ингибитора основана на реакции гидрирования, предложенной Азатьяном (3.26) – (3.27).

Для численного исследования использовалась оригинальная программа, написанная на языке C стандарта ISO 89, которая не связана с конкретной операционной системой. В ней используется система распараллеливания OpenMP с соответствующими библиотеками работы с нитями исполнения. Детали реализации численного алгоритма представлены в Приложении A.1. Расчеты проводились с использованием равномерной сетки из квадратных элементов размером 25 мкм, что соответствует значению 4000x800 ячеек для расчетной области с размерами $L_x = 10$ см, $L_y = 2$ см и 6000x800 ячеек для расчетной области с размерами $L_x = 15$ см, $L_y = 2$ см. Первая серия тестов была проведена для значений объемной концентрации ингибитора 0, 0.8, 0.9 и 1% по отношению ко всей смеси. При отсутствии ингибитора в испытуемой смеси детонация распространяется, переходя через некоторое время в ячеистый режим. Оказалось, что для 0.8% детонация в исследуемой смеси также распространяется, для 0.9% детонация сначала спиновая, но затем спин переходит в полноценную ячеистую детонацию, для 1% спиновый режим не формируется, детонация подавляется. Фактически это не полноценный спиновый режим, а начальная стадия формирования ячеистого режима, обусловленная первичной конфигурацией инициирующих волн. Полученные цифры значительно меньше тех, что были получены в предыдущих испытаниях, когда детонация в такой смеси подавлялась при концентрации от 2 до 3%. Причина в том, что в смесь попала детонационная

волна с другой (очень мелкоячеистой) структурой, а собственная ячеистая структура сформировалась уже в исследуемой смеси. До формирования полноценной ячеистой структуры детонационная волна гораздо более чувствительна к распаду.

Поэтому во второй серии испытаний ставится вопрос, что произойдет, если детонационная волна с уже развитой структурой и уже достаточно большими ячейками, соответствующими исследуемой смеси без ингибитора, встретится со смесью с ингибирующей добавкой. Именно поэтому протяженность области I_1 и расчетной области были увеличены на 5 см и стали соответственно $L_{mx} = 7$ см и $L_x = 15$ см. Исходная смесь при давлении 1 бар и температуре 500 К.

Ниже приведены результаты численного исследования формирования ячеистой детонации в смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ при прямом инициировании в области I_1 при $L_{mx} = 2$ см и перехода ее в область I_0 в смесь $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 4\text{N}_2 + \text{ингибитор}$ при $L_x = 10$ см (см. рисунок 3.1).

На рисунке 3.7 для сравнения представлены распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 50 мкс при начальной температуре смеси 500 К и концентраций пропилена: 0, 0.8, 0.9 и 1.0 объемных процентов, иллюстрирующие ячеистую структуру детонации.

Из рисунка следует, что при концентрации ингибитора 0.9% становятся заметными небольшие различия в распределениях, созданные с увеличением размера детонационной ячейки. Хорошо видно, что при концентрации 1% ячеистая детонация быстро подавляется. Вертикальная линия в левой части рисунка, совпадает с границей областей, в одной из которых смесь $2\text{H}_2 + \text{O}_2$, а в другой $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 4\text{N}_2 + \text{ингибитор}$. Эта линия – результат процессов, связанных с переходом детонационной волны через границу раздела смесей различного состава. Яркая область слева – зона инициирования.

На рисунке 3.8 изображены поля давления в момент времени 50 мкс.

Из рисунка 3.8 видно, что распространяющаяся самоподдерживающаяся детонация имеет ячеистую структуру с ярко выраженными поперечными волнами. Для концентрации 1% C_3H_6 детонация подавляется, и вырождается в ударную волну. Обращает на себя внимание, что увеличение концентрации ингибитора приводит к увеличению размера ячеек и уменьшению скорости волны детонации, что выражается в уменьше-

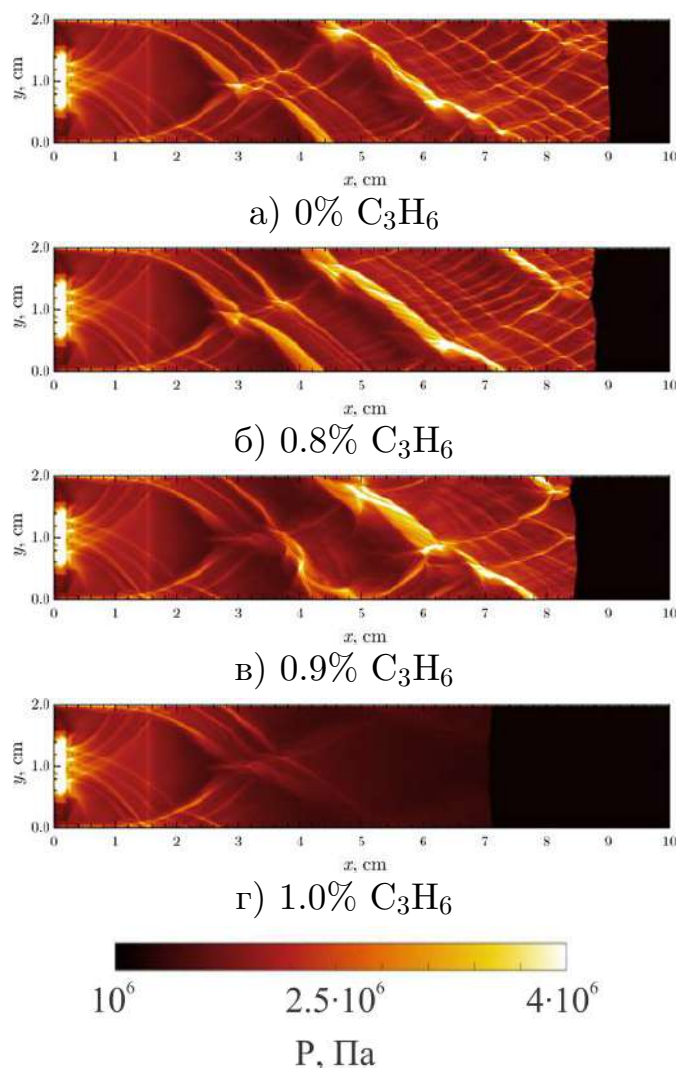


Рисунок 3.7 — Сравнение распределений максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 50 мкс при начальной температуре смеси 500 К и концентрациях пропилена: 0, 0.8, 0.9 и 1.0 объемных процентов.

нии расстояния, пройденного волной к моменту времени 50 мкс. Эти два эффекта тесно связаны между собой, и позволяют понять один из возможных, а может быть, и главный механизм ослабления и подавления детонации ингибитором. В работах сотрудников московской школы исследователей детонации, основанной академиком Г.Г. Черным и возглавляемой ныне академиком В.А. Левиным [79; 127; 166], методом виртуального эксперимента установлено, что в рамках как упрощенных, так и сложных многостадийных кинетических механизмов, одномерная детонация является нестационарным процессом, а ее существование и распространение связано с периодическим формированием и распространением по зоне ин-

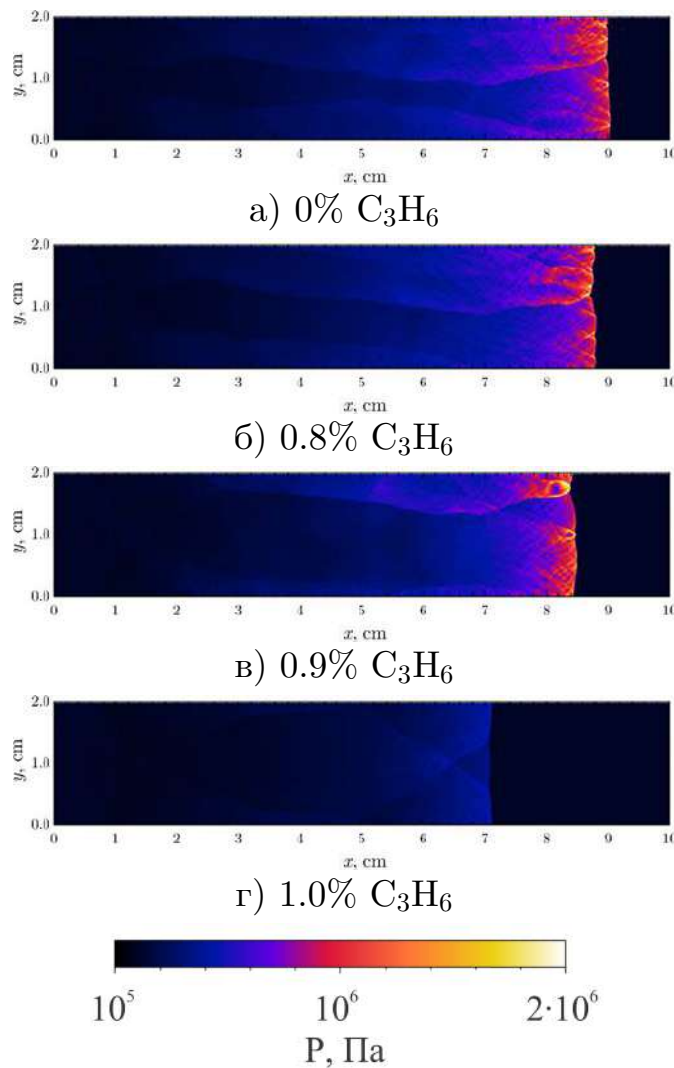


Рисунок 3.8 — Поля давления в момент времени 50 мкс.

дукции комплекса, состоящего из самоускоряющегося фронта пламени и внутреннего скачка уплотнения перед ним. Этот комплекс фактически является внутренней волной детонации. Распространяясь по зоне индукции, она дожигает горючую смесь, нагретую в головной ударной волне, догоняет и сливается с ней, что приводит к образованию новой головной ударной волны с высокими давлением и температурой на ее фронте, которая способна поджечь смесь. По существу периодически происходит прямое взрывное инициирование детонации, и поэтому можно говорить, что детонация существует благодаря взлам во взрыве. В случае двумерной волны детонации из-за появления дополнительной степени пространственной свободы, согласно расчетам в достаточно широких каналах, развиваются двумерные возмущения и вместо упомянутой выше внутренней волны детонации появляются поперечные волны, распространяющиеся вдоль головного ударного

фронта по нагретой в нем смеси, которые дожигают ее, взаимодействуют между собой и со стенками канала. Это взаимодействие по эффекту подобно описанному выше взрыву во взрыве и также порождает способные к воспламенению смеси ударные волны. Из сказанного следует, что двумерную детонацию можно подавить, устранив каким-либо способом поперечные волны. Но на рисинке 3.8 видно, что с ростом концентрации ингибитора увеличивается размер ячейки и уменьшается их число, то есть число микровзрывов, поддерживающих детонацию. При концентрации пропилена в 1% поперечных волн нет и поэтому нет детонации. Согласно результатам работы [23], в которой теоретически впервые установлена зависимость размера детонационной ячейки от поперечного размера канала, в частности, существование его критической величины, такой, что в каналах с меньшего ее поперечника двумерная ячеистая детонация не формируется, а реализуется описанный выше одномерный процесс, поддерживаемый взаимодействием распространяющейся по зоне индукции продольной волны детонации. Основываясь на том факте, можно сделать вывод, что при концентрации пропилена в 1% поперечник расчетной области оказывается меньше критического для исследуемой смеси, а потому и нет детонации. Кроме того, можно утверждать, что при рассмотренных концентрациях пропилена, в том числе нулевой, ячеистая детонация не сформируется (будет подавлена) в каналах с поперечником, меньшим критического, и предложить метод подавления детонации, помещая в канале решетку с просветами, размера, меньше критического. Следует заметить, что наблюдаемое с увеличением размера детонационной ячейки уменьшение скорости волны детонации связано с возрастанием времени между столкновениями поперечных волн. Дело в том, что скорость ее фронта с изгибами и изломами, определяется переменной скоростью головной ударной волны в продольном направлении от одной точки столкновения поперечных волн до другой. Эти точки соответствуют вершинам ромбовидной детонационной ячейки, а скорость фронта уменьшается от максимальной до минимальной величины. Согласно расчетам, чем больше диагональ ромба, тем меньше величина минимальной скорости. Поэтому средняя по ячейке скорость, а с ней средняя скорость волны детонации уменьшается с увеличением размера ячейки.

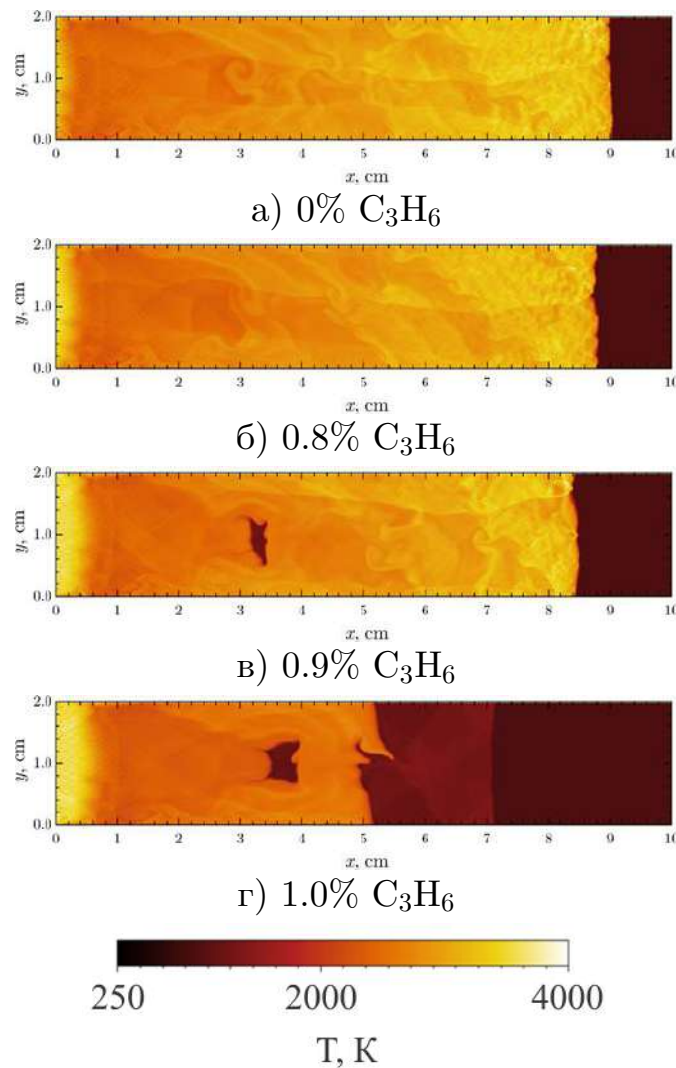


Рисунок 3.9 — Поля температуры в момент времени 50 мкс.

С другой стороны, уменьшение средней скорости волны детонации с увеличением концентрации ингибитора можно связать с увеличением молярной массы смеси и соответствующим уменьшением скорости звука в ней, так как энергия смеси остается практически неизменной. Но этого недостаточно (не хватает ингибитора). Фактически энергия выделения в детонационной волне уменьшается из-за того, что выделение части энергии из-за ингибитора задерживается, а дожигание уже не влияет на скорость волны, и поэтому скорость волны уменьшается. В целом, оба фактора, молярная масса и энергия, могут быть причиной снижения скорости детонационной волны.

На рисунке 3.9 видно, что при концентрации пропилена 1% ударная волна, заметная по росту температуры, отделена от области горения, т.е. детонация подавлена. В левой части расчетной области во всех случаях видна

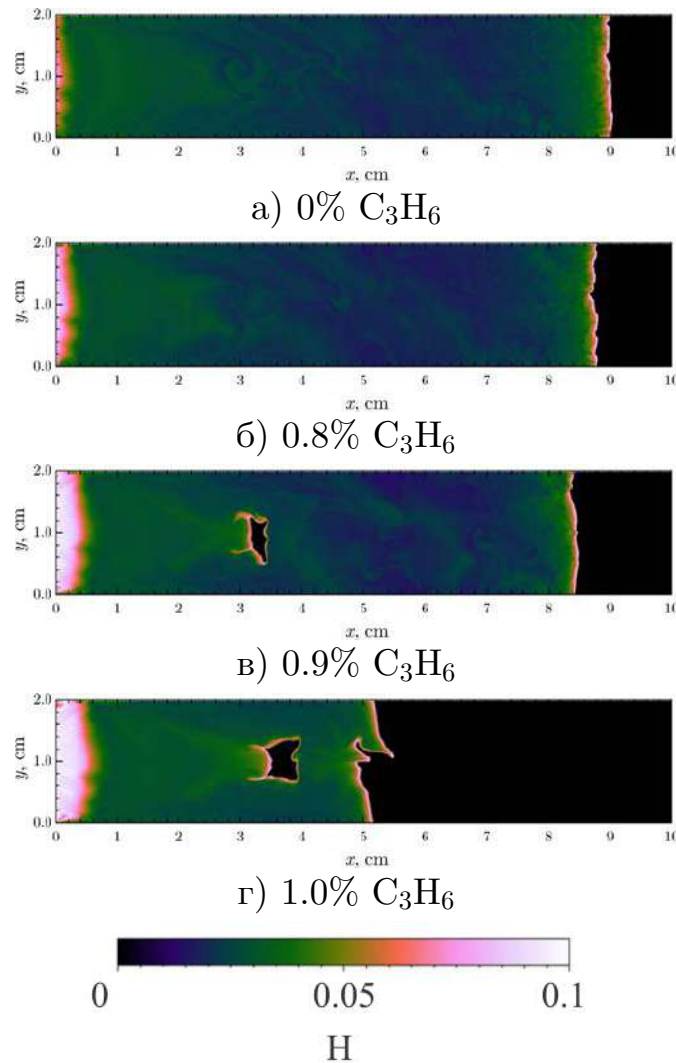


Рисунок 3.10 — Распределение молярной концентрации атомарного водорода H в момент времени 50 мкс после инициирования. Зарождение детонационной волны в смеси $2H_2 + O_2$, заход детонационной волны в водородно-воздушную смесь с различным содержанием ингибитора.

область высоких температур, связанная с тем, что сгоревшая стехиометрической смеси $2H_2 + O_2$, послужившей инициатором, к моменту 50 мкс еще не успела полностью покинуть канал через левую открытую границу.

На рисунке 3.10 для сравнения представлено распределение молярной концентрации атомарного водорода H при нескольких концентрациях пропилена в момент времени 50 мкс.

На рисунке 3.10 видна область несгоревших газов (карман), образующаяся при заданной конфигурации расчетной области и инициаторов. Этот карман заметен при концентрациях ингибитора 0.9 и 1%, причем в послед-

нем случае он увеличен. Это явно свидетельствует о снижении скорости реакции.

Далее рассматривается задача о распространении ячеистой детонации, когда в области I_1 размером 7x2 см – стехиометрическая смесь водорода с воздухом, а в области I_0 размером 8x2 см – смесь водорода, воздуха и ингибитора. Размеры зоны зажигания прежние 0.4x1.6 см. Согласно результатам расчетов для подавления развывшейся ячеистой детонации в области I_0 требуется более высокая концентрация ингибитора, чем для подавления детонации в области в I_1 .

На рисунке 3.11 для сравнения представлены распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 80 мкс при начальной температуре смеси 500 К и атмосферном давлении для концентраций пропилена: 0, 1, 1.5 и 2 объемных процентов.

Из рисунке 3.11 видно, что с увеличением концентрации ингибитора детонационные ячейки увеличиваются очень незначительно (по-видимому, их увеличение приближается к порогу подавления). Подавление детонации происходит при объемной концентрации ингибитора 2% по отношению к объему смеси, и не происходит при объемном содержании ингибитора 1.5%. Эти цифры в 2 раза выше, чем полученные в ранее рассмотренных условиях инициирования детонации, и в то же время совпадают с результатами исследований [I], где инициирование осуществлялось прямым возбуждением детонации в смеси с ингибитором без посредничества инициирующей смеси, то есть в аналогичных условиях. Отсюда следует вывод, что инициирование детонации внешним воздействием волны с мелкими ячейками (меньшими, чем ячейки в рассматриваемой смеси) подавляется меньшим количеством ингибитора. Причина может заключаться в том, что при формировании новой ячеистой структуры детонация ослаблена по сравнению с последующим процессом формирования ячеистого самоподдерживающегося комплекса, и именно на этом минимуме ослабления ингибитору легче предотвратить развитие этого комплекса.

На рисунке 3.12 для сравнения представлены поля давления в момент времени времени 80 мкс при начальной температуре смеси 500 К и атмосферном давлении для концентраций пропилена: 0, 1, 1.5 и 2 объемных процентов.

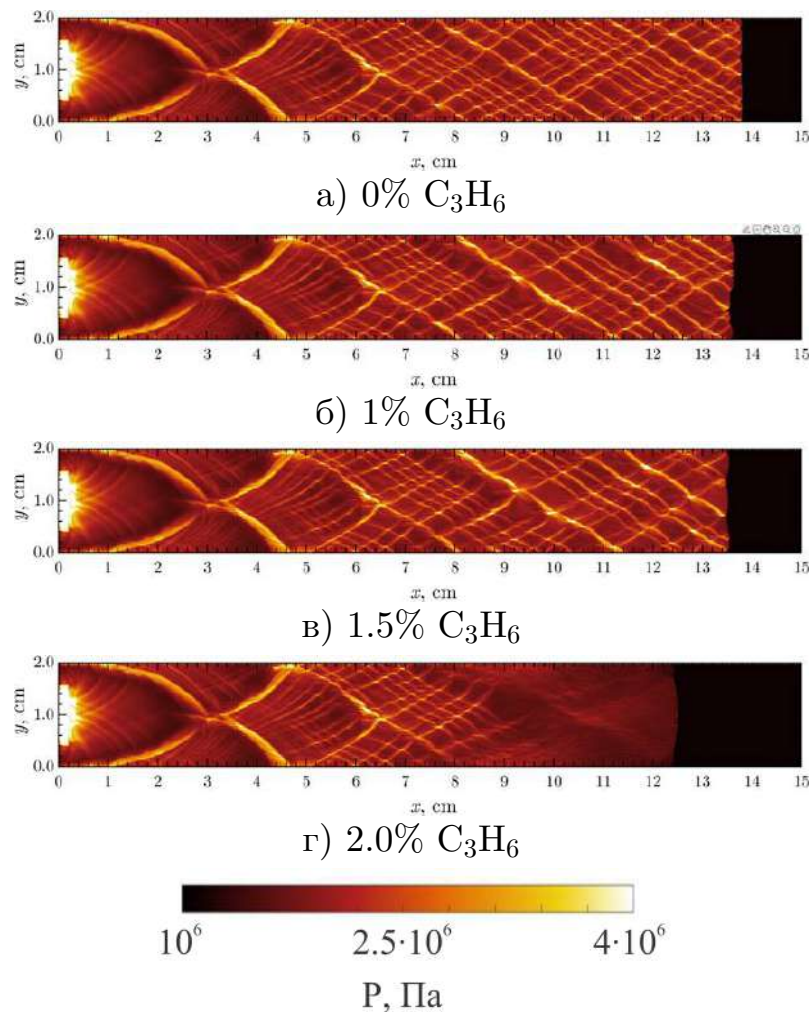


Рисунок 3.11 — Сравнение распределений максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 80 мкс при начальной температуре смеси 500 К и атмосферном давлении для концентраций пропилена: 0, 1, 1.5 и 2 объемных процентов, иллюстрирующие ячеистую структуру детонации.

На рисунке 3.13 для сравнения приведены поля температуры в момент времени 80 мкс при начальной температуре смеси 500 К и атмосферном давлении для концентраций пропилена: 0, 1, 1.5 и 2 объемных процентов.

Из рисунка 3.13 видно, что здесь поля температуры подобны представленным ранее. В отличие от предыдущих результатов, здесь нет высокотемпературной области вблизи левого торца т.к. газ из зоны инициирования покинул область через левую границу гораздо раньше, чем показано на рисунке, а первичная смесь имеет тот же состав, что и основная, за исключением ингибитора.

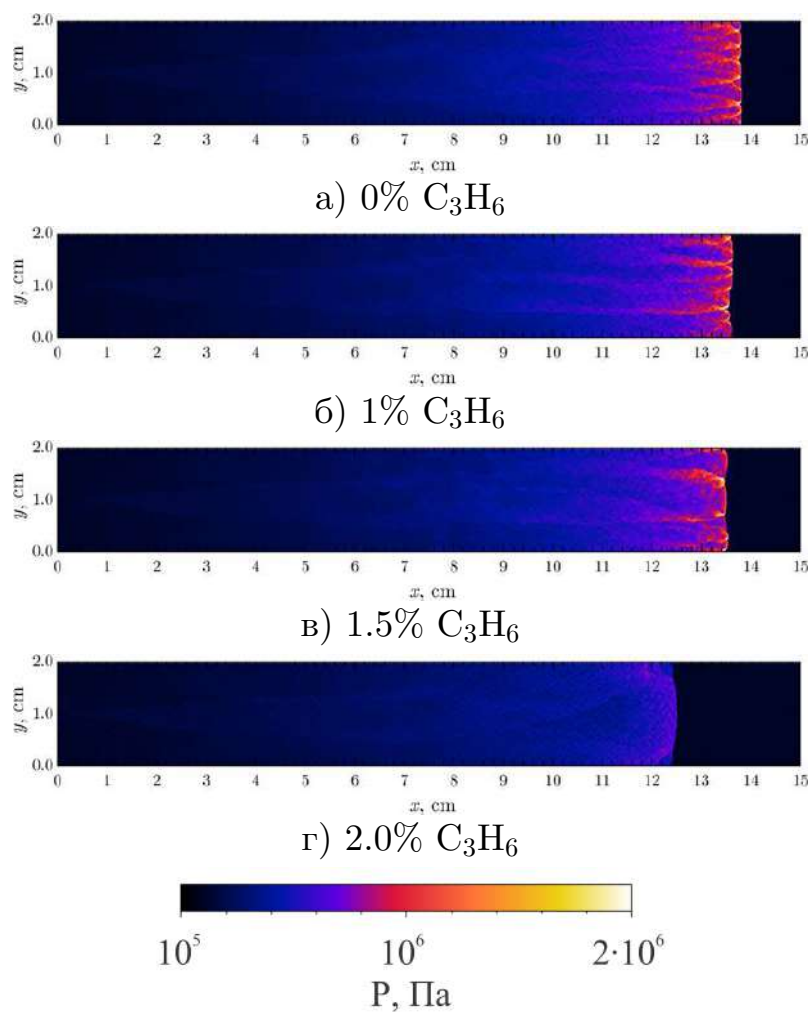


Рисунок 3.12 — Поля давления в момент времени 80 мкс при начальной температуре смеси 500 К и атмосферном давлении для концентраций пропилена: 0, 1, 1.5 и 2 объемных процентов, иллюстрирующие ячеистую структуру детонации.

На рисунке 3.14 для сравнения приведены распределения объемной концентрации атомарного водорода Н в момент времени 80 мкс при начальной температуре смеси 500 К и атмосферном давлении для концентраций пропилена: 0, 1, 1.5 и 2 объемных процентов.

Зоны высоких концентраций атомарного водорода на представленных рисунках являются индикаторами фронт реакции. В условиях химического равновесия в продуктах сгорания более высокая концентрация атомарного водорода указывает на области с более высокой температурой. Видно, что в случае детонации фронт относительно однороден и не сильно отличается при рассмотренных концентрациях пропилена, в отличие от случая, когда детонация подавляется. Можно также отметить, что с увеличением кон-

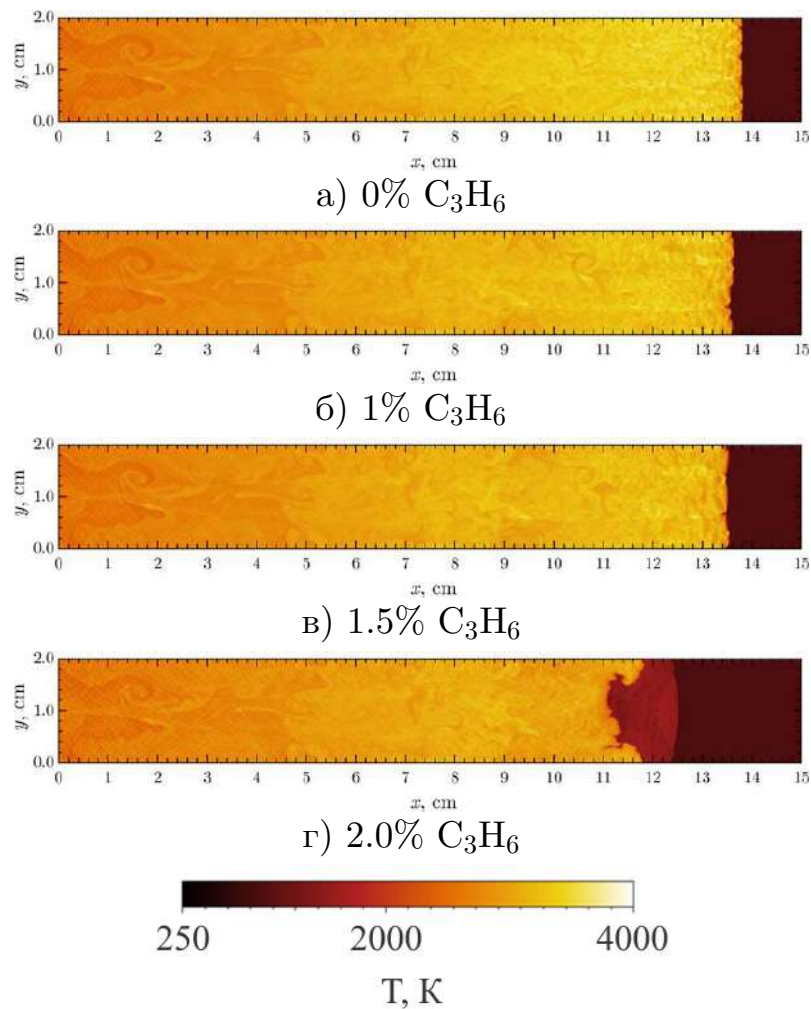


Рисунок 3.13 — Распределение температуры в момент времени 80 мкс при начальной температуре смеси 500 К и атмосферном давлении для концентраций пропилена: 0, 1, 1.5 и 2 объемных процентов.

центрации ингибитора максимальная концентрация атомарного водорода во фронте реакции уменьшается (особенно заметно при переходе от 1.5 до 2% C_3H_6). Это связано с расходом атомарного водорода на гидрирование ингибитора, который служит фактором, замедляющим реакцию и, соответственно, подавляющим детонацию при достаточном количестве ингибитора. Также в левой части области отсутствует зона высокой концентрации Н. Это связано с тем, что детонация инициируется и распространяется сначала в смеси водорода с воздухом, а затем в такой же смеси с добавкой ингибитора. Ранее волна инициировалась в смеси водорода с кислородом, что обеспечивало более высокую температуру, и более высокую концентрацию Н в равновесном состоянии.

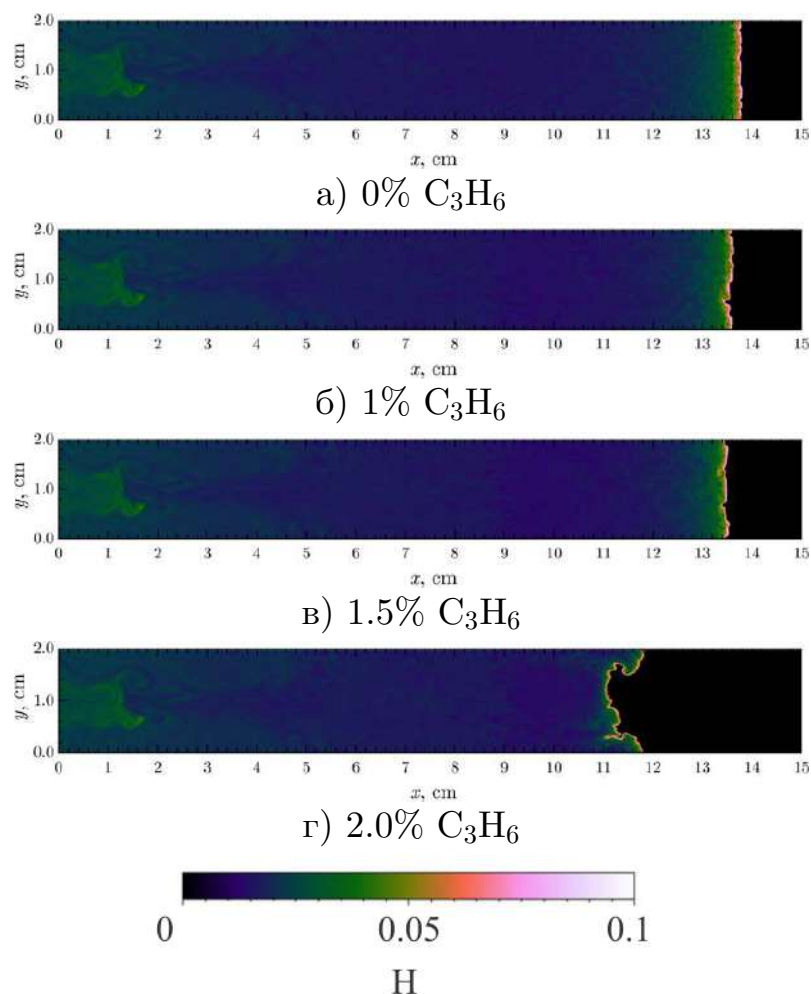


Рисунок 3.14 — Распределение объемной концентрации атомарного водорода H в момент времени 80 мкс при начальной температуре смеси 500 К и атмосферном давлении для концентраций пропилена: 0, 1, 1.5 и 2 объемных процентов

3.4.3 Определение пределов детонации при ингибировании водородо-воздушной смеси с использованием расширенного и сокращенного кинетического механизма

В настоящем разделе рассматривается задача об определении пределов распространения ячеистой детонации в водородо-воздушной смеси по концентрации ингибитора в канале.

Для решения этой задачи численно исследуется течение в канале, для которого расчетная область представлена на рисунке 3.1.

Расчеты проводились при следующих значениях линейных размеров расчетной области: $L_x = 5$ см, $L_y = 2$ см, $L_{mx} = 5$ см, $L_{ix} = 0.2$ см, $L_{iy} = 1.6$ см. Для инициирования детонации в область у левой границы шириной 0.2 см и длиной 1.6 см подводилась энергия внешним источником мощности $Q = 20$ МВт/см³ в течении 1 мкс. На верхней и нижней границах расчетной области ставилось условие непротекания, а на правой и левой – условие открытой границы.

В начальном состоянии в области I_1 находится неподвижная стехиометрическая водородно-воздушная смесь, а в области I_0 – смесь топлива с ингибитором следующих составов:

1. $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6]=1:1:4:\alpha$
2. $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6]=1.5:1:4:\alpha$
3. $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6]=2:1:4:\alpha$
4. $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6]=2.5:1:4:\alpha$
5. $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6]=3:1:4:\alpha$
6. $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6]=3.3:1:4:\alpha$
7. $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6]=5:1:4:\alpha$
8. $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6]=5.8:1:4:\alpha$

Здесь α - доля пропилена.

В расчетах использовалось два кинетических механизма:

1. Кинетический механизм, разработанный командой из Института химической физики имени Н.Н. Семёнова РАН [198]. Данный механизм содержит 58 компонент и 404 реакций. В представленной работе данный механизм в дальнейшем будет обозначаться по фамилии одного из авторов А.М. Терезы. (Tereza)
2. С целью оценки возможности уменьшения времени расчетов рассмотрен редуцированный кинетический механизм Tereza, в котором были исключены углеводороды и добавлена реакция, предложенная В.В. Азатьяном для учета влияния ингибитора на систему (3.26) – (3.27). Всего данный механизм содержит 13 компонент и 31 реакцию (Tereza r)

Расчеты проводились при начальной температуре смеси 400 К и атмосферном давлении. Волна детонации, инициированная у левой границы, сначала распространяется по стехиометрической водородно-воздушной смеси по зоне I_1 , затем по водородно-воздушной смеси (обедненной, обо-

гащенной или стехиометрической) с добавлением небольшого количества ингибитора.

Ниже представлены результаты расчетов для случая 1: $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6] = 1:1:4:\alpha$ при концентрациях пропилена.

На рисунках 3.15 и 3.16 приведены распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области, и поля температуры на момент времени 100 мкс, полученные с использованием сокращенного кинетического механизма (Tereza r).

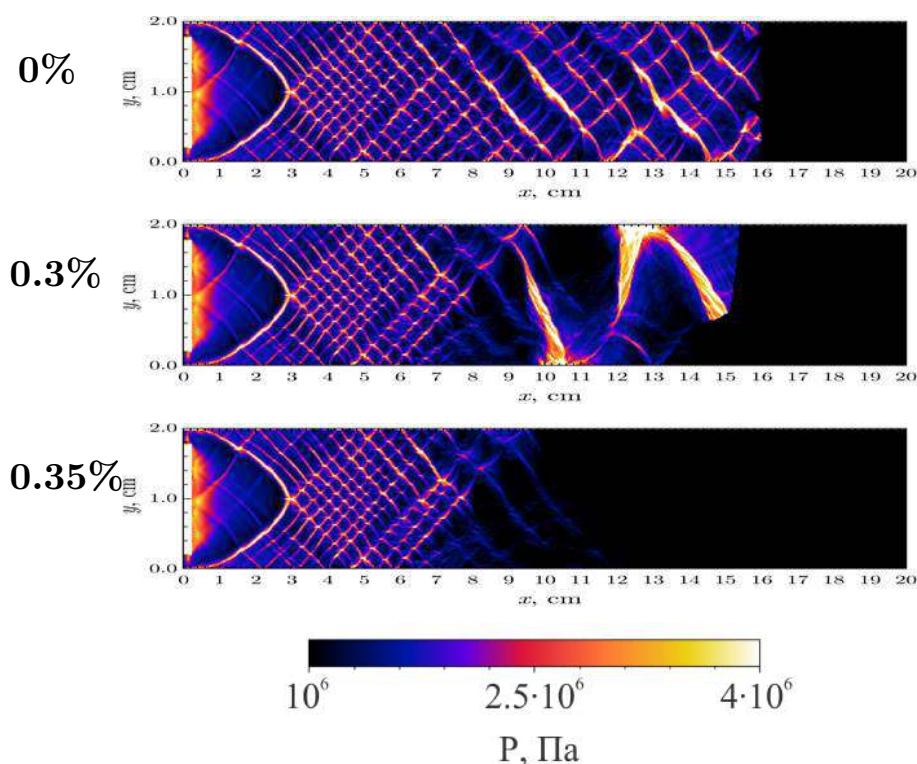


Рисунок 3.15 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 0.3 и 0.35 объемных процентов (Tereza r).

Из рисунка 3.15 следует, что добавление ингибитора приводит к радикальному изменению ячеистой сируктуры. При концентрации пропилена 0.03% вместо множества ячеек наблюдается половина ячейки, что свидетельствует о возникновении одной поперечной волны и одной тройной точки. Эта волна сформировалась у верхней стенки, отразилась от нижней, затем от верхней и загасла. Зигзагообразная траектория движения тройной точки, соответствующей этой поперечной волне, хорошо видна на рисунке.

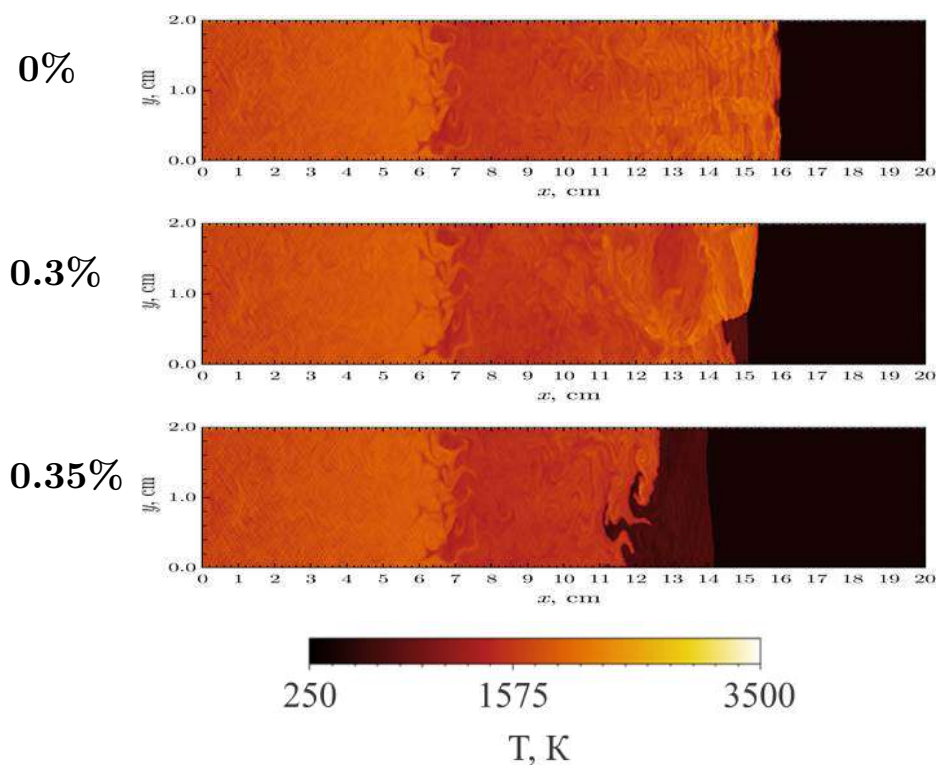


Рисунок 3.16 — Поля температуры в момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 0.3 и 0.35 объемных процентов (Tereza r).

На рисунке 3.16 хорошо видна пространственная неоднородность температуры продуктов детонации. Яркая часть в левой части области соответствует расположению продуктов реакции первичной стехиометрической горючей смеси, используемой для инициирования детонации. Менее яркие области соответствуют продуктам горения обедненной смеси, и наименьшая яркость характеризует зону непрореагировавшей смеси, нагретой в ударной волне в случае гашения детонации.

На рисунках 3.17 и 3.18 представлены распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области и поля температуры на момент времени 100 мкс, полученные с использованием расширенного кинетического механизма (Tereza).

Из рисунков 3.17 и 3.18 видно, что, несмотря на некоторые различия распределений максимальных значений давления и температуры, полученных с использованием расширенного механизма и сокращенного механизма (рисунки 3.15 и 3.16), общие результаты по действию ингибитора представляются близкими, что свидетельствует об возможности использования сокращенного кинетического механизма.

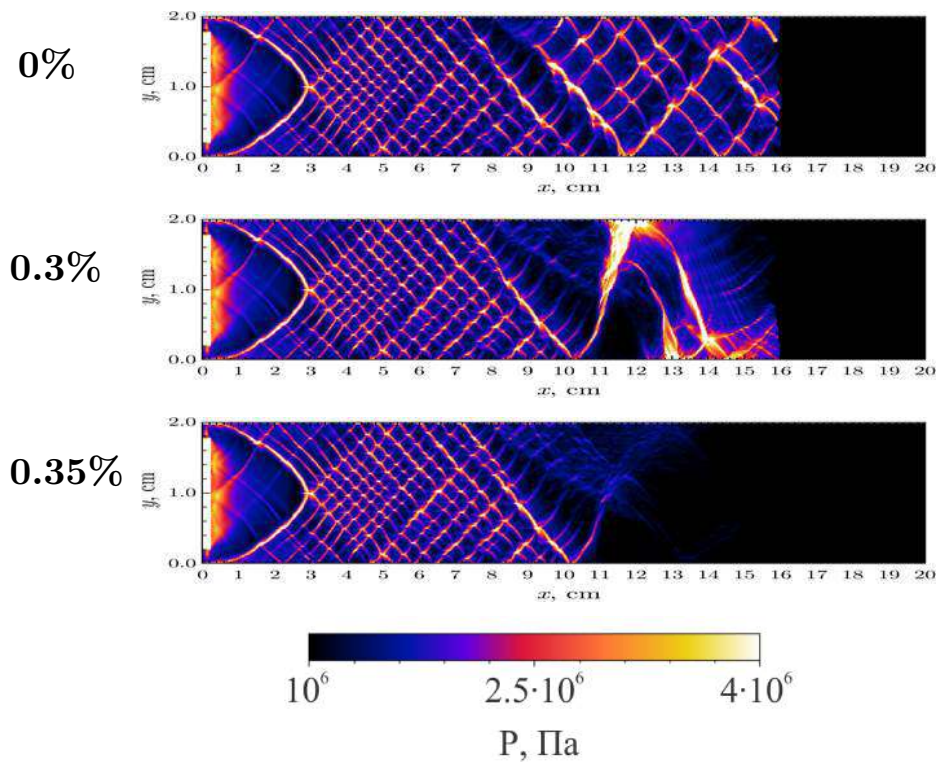


Рисунок 3.17 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 0.3 и 0.35 объемных процентов (Tereza).

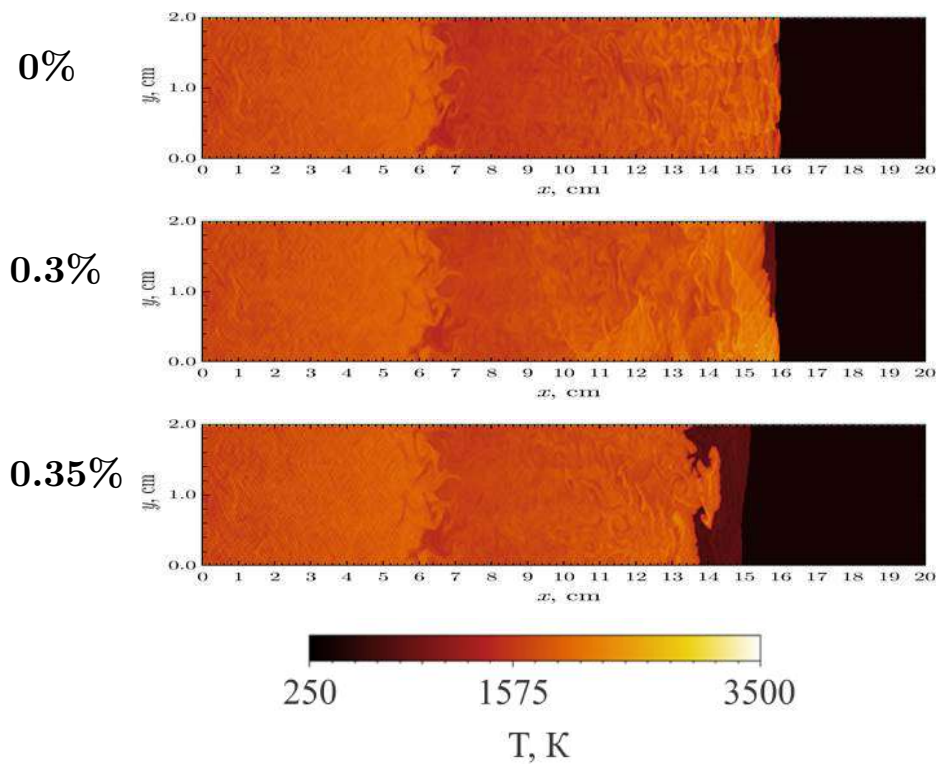


Рисунок 3.18 — Поля температуры в момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 0.3 и 0.35 объемных процентов (Tereza).

Ниже представлены результаты расчетов для случая 2 : $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6] = 1.5:1:4:\alpha$ при концентрациях пропилена.

На рисунках 3.19 и 3.20 приведены распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области и поля температуры на момент времени 100 мкс, полученные с использованием сокращенного кинетического механизма (Tereza).

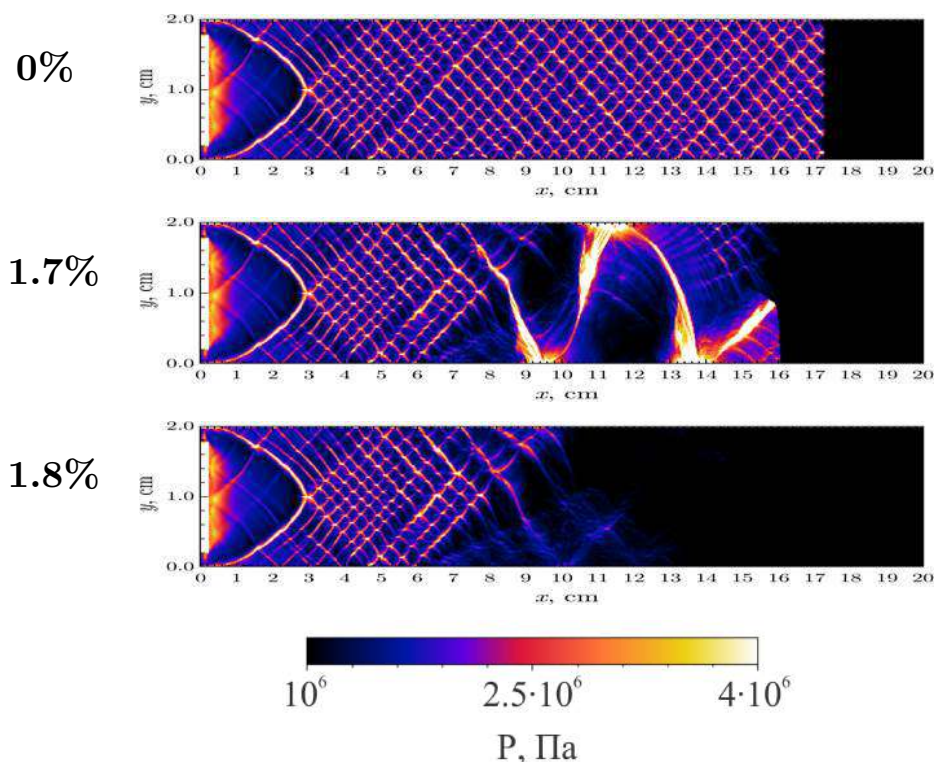


Рисунок 3.19 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 1.7 и 1.8 объемных процентов (Tereza r).

Из рисунков 3.19 и 3.20 видно, что для подавления детонации, при увеличении содержания водорода в обедненной смеси необходимо также увеличить содержание ингибитора. В предыдущем случае пропилена в 0.35% было достаточным для подавления детонации, в то время как в смеси, рассматриваемой в случае 2, для подавления детонации потребовалось добавить в смесь 1.8% пропилена.

На рисунках 3.21 и 3.22 приведены распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области и поля температуры на момент времени 100 мкс и концентрациях пропилена: 0,

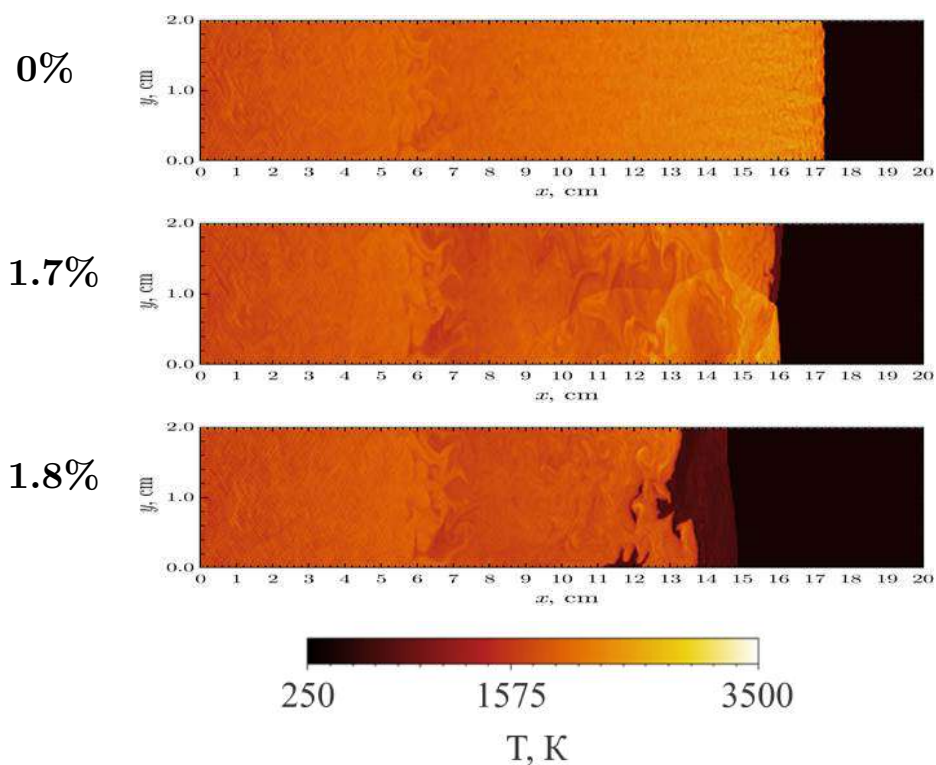


Рисунок 3.20 — Поля температуры в момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 1.7 и 1.8 объемных процентов (Tereza r).

2.5 и 2.7 объемных процентов, полученные с использованием расширенного кинетического механизма (Tereza).

Из сравнения представленных рисунков 3.19-3.22 показывает, что при повышенном содержании водорода результаты с расширенным кинетическим механизмом демонстрируют, что при повышении содержания водорода необходимо более высокое предельное содержание ингибитора для гашения детонационной волны. А именно, 2.7% по сравнению с 1.8%, полученным с использованием сокращенного кинетического механизма. Из рисунка 3.21 видно, что при 2.5%-ном содержании C_3H_6 первоначальная ячеистая структура разрушается, но затем она восстанавливается в виде структуры другого размера, которая, тем не менее, может поддерживать распространение детонации.

Ниже представлены результаты расчетов для случая 3 : $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6] = 2:1:4:\alpha$, полученные с использованием сокращенного (рисунки 3.23-3.24) и расширенного (рисунки 3.25-3.26) кинетического механизма.

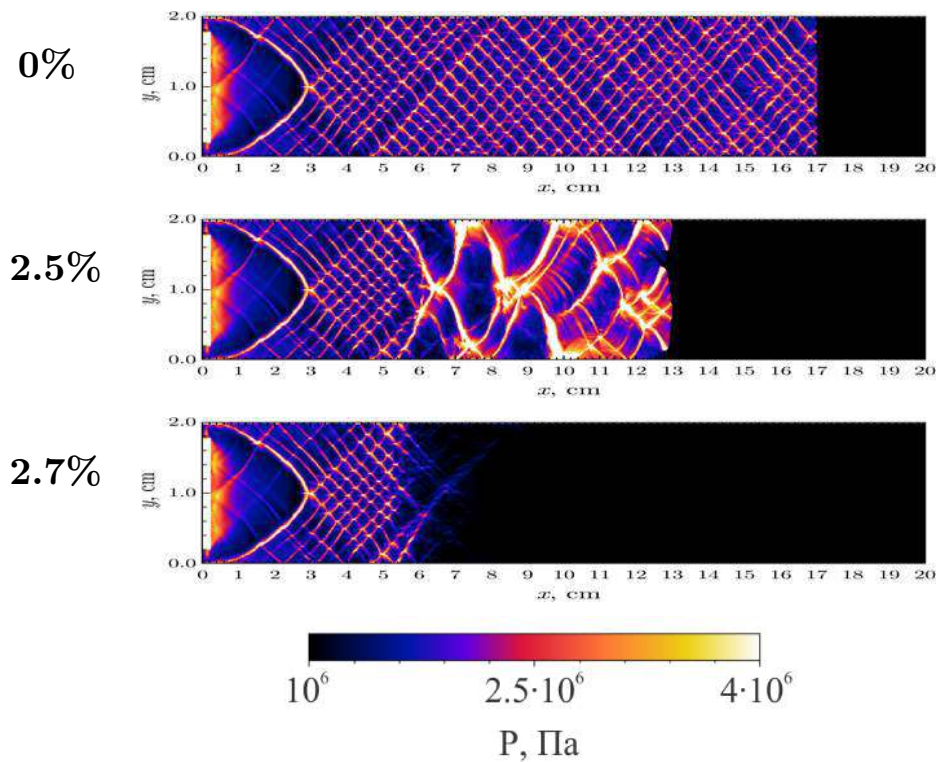


Рисунок 3.21 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 2.5 и 2.7 объемных процентов (Tereza).

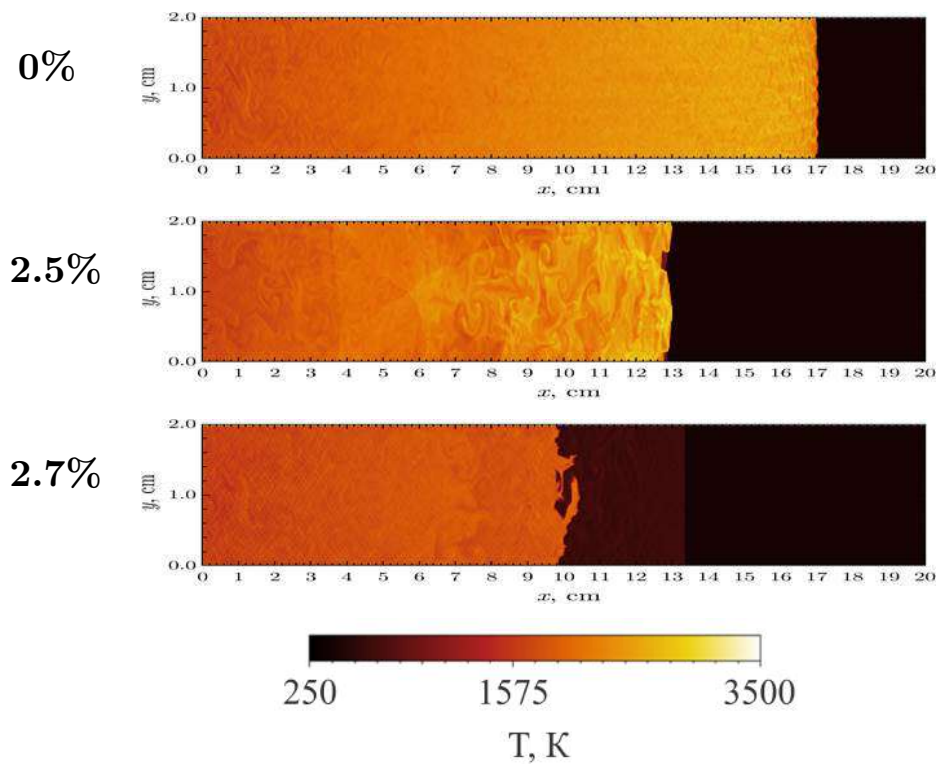


Рисунок 3.22 — Поля температуры в момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 2.5 и 2.7 объемных процентов (Tereza).

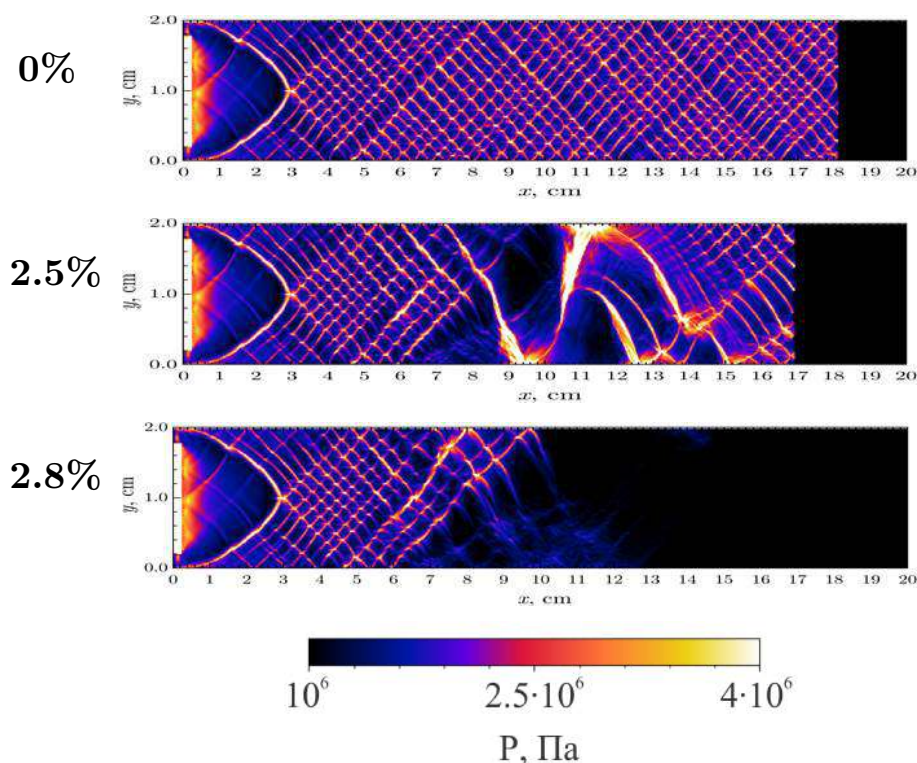


Рисунок 3.23 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 2.5 и 2.8 объемных процентов (Tereza r).

На этих рисунках приведены распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области и поля температуры на момент времени 100 мкс. Сравнение показывает, что полученная с использованием сокращенного кинетического механизма концентрация пропилена, при которой детонация гаснет, равна 2.8%, тогда как с использованием расширенного механизма она несколько меньше и равна 2.4%. В обоих случаях при содержании ингибитора, близком к пределу гашения детонации (при 2.5% C_3H_6 с использованием сокращенного и при 2.3% C_3H_6 - расширенного кинетического механизма) получаются близкие картины ячейистой структуры детонации. По ним видно, что происходит установление некоторого скачкообразного режима детонации, при котором ячейистая структура трансформируется так, что остаются одна или две крупные ячейки. Затем она восстанавливается, все еще имея нерегулярный характер, тем не менее достаточный для поддержания распространения ячейистой детонационной волны. Следует заметить, что аналогичное поведение детонации при предельном содержании ингибитора наблюдалось в обедненных смесях

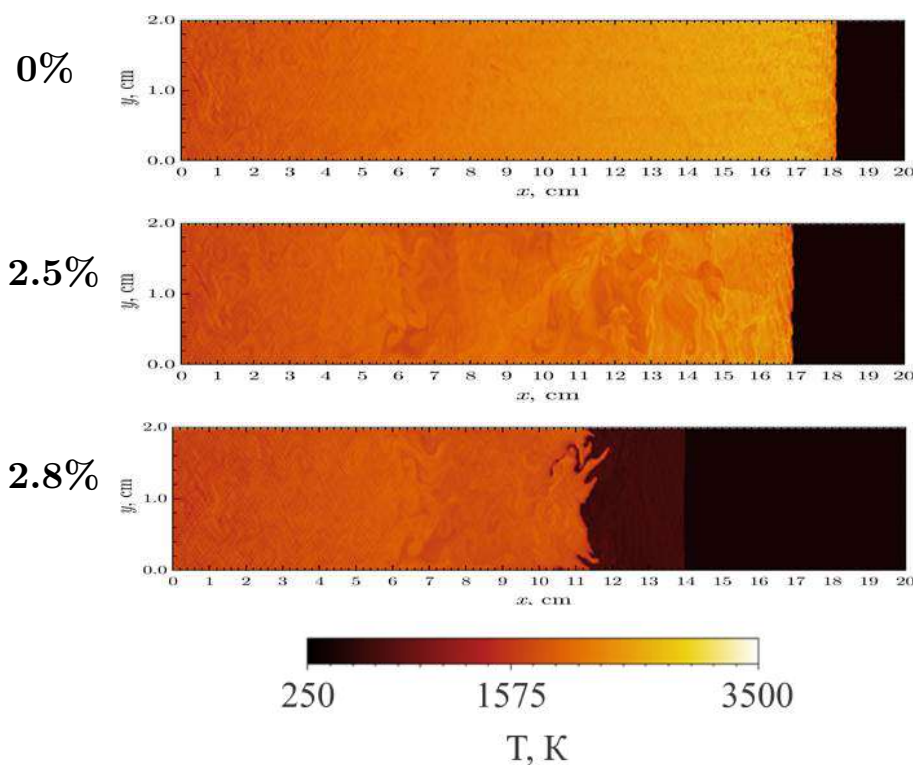


Рисунок 3.24 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 2.5 и 2.8 объемных процентов (Tereza r).

$[H_2]:[O_2]:[N_2]=1.5:1:4$ (рисунки 3.19 и 3.21) для обоих кинетических механизмов.

Сравнивая результаты, полученные с использованием сокращенного и расширенного кинетических механизмов, можно видеть, что для обедненной смеси $[H_2]:[O_2]:[N_2]=1.5:1:4$ расчет с расширенным механизмом дает более высокое содержание ингибитора, необходимого для подавления детонации, тогда как для стехиометрической смеси расчет дает немного большее содержание с использованием сокращенного механизма.

Ниже представлены результаты расчетов для случая 4: $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6] = 2.5:1:4:\alpha$, полученные с использованием сокращенного (рисунки 3.27 и 3.28) и расширенного (рисунки 3.29-3.30) кинетического механизма.

На этих рисунках приведены распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области и поля температуры на момент времени 100 мкс. Из рисунков хорошо видно, что при увеличении в смеси концентрации водорода концентрация пропилена для подавления детонации увеличивается незначительно и составляет 2.85%

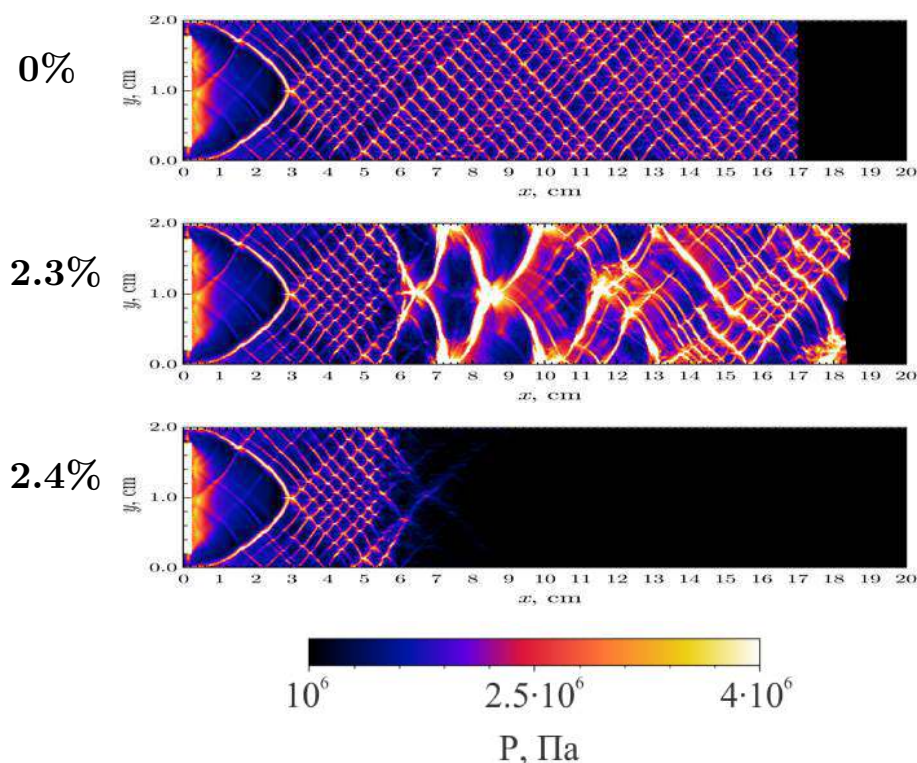


Рисунок 3.25 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 2.3 и 2.4 объемных процентов, полученные с использованием расширенного кинетического механизма (Tereza).

по сравнению со случаем 3, где она составляла 2.8%. Как и ранее при концентрации ингибитора, близкой к критической, ячеистая структура вырождается до одной ячейки, а затем она восстанавливается, и детонационная волна продолжает распространяться. Как следует из сравнения представленных распределений давления и полей температур, при увеличенном содержании водорода в обогащенной смеси при использовании в расчетах расширенного кинетического механизма детонация подавляется при концентрации пропилена 2.2%, а при использовании сокращенного механизма при концентрации пропилена 2.85%. Из рисунка 3.29 видно, что при концентрации 2.0% ячеистая структура разрушается ингибитором так, что остается одна ячейка, но затем ячеистая структура восстанавливается в виде структуры с ячейками другого размера.

Сравнение показывает, что полученная с использованием сокращенного кинетического механизма концентрация пропилена, при которой

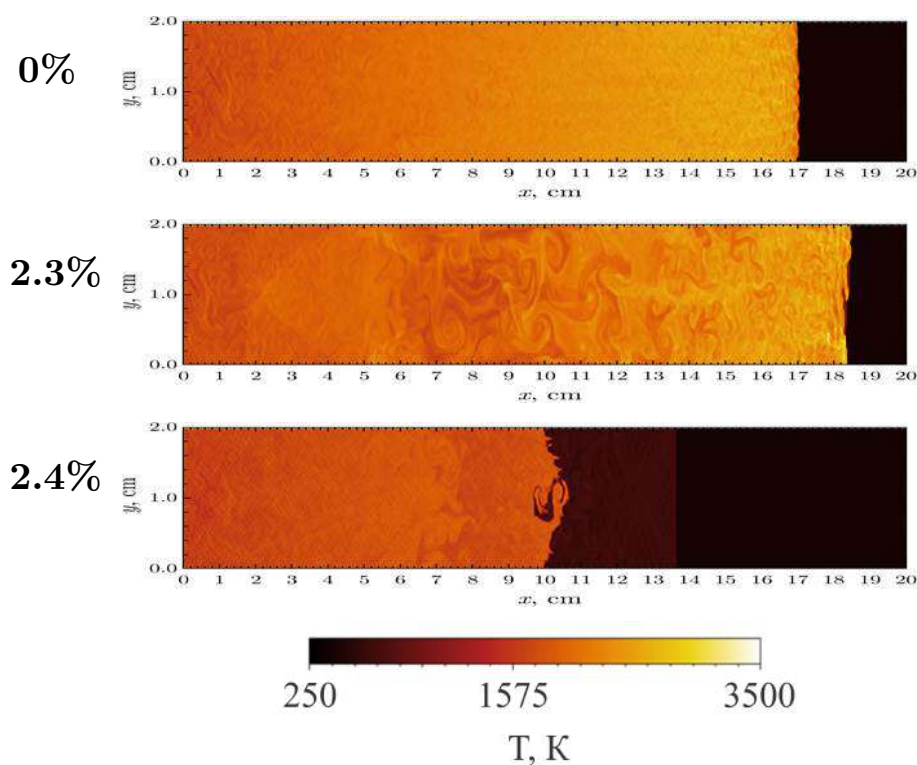


Рисунок 3.26 — Поля температуры на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 2.3 и 2.4 объемных процентов (Tereza).

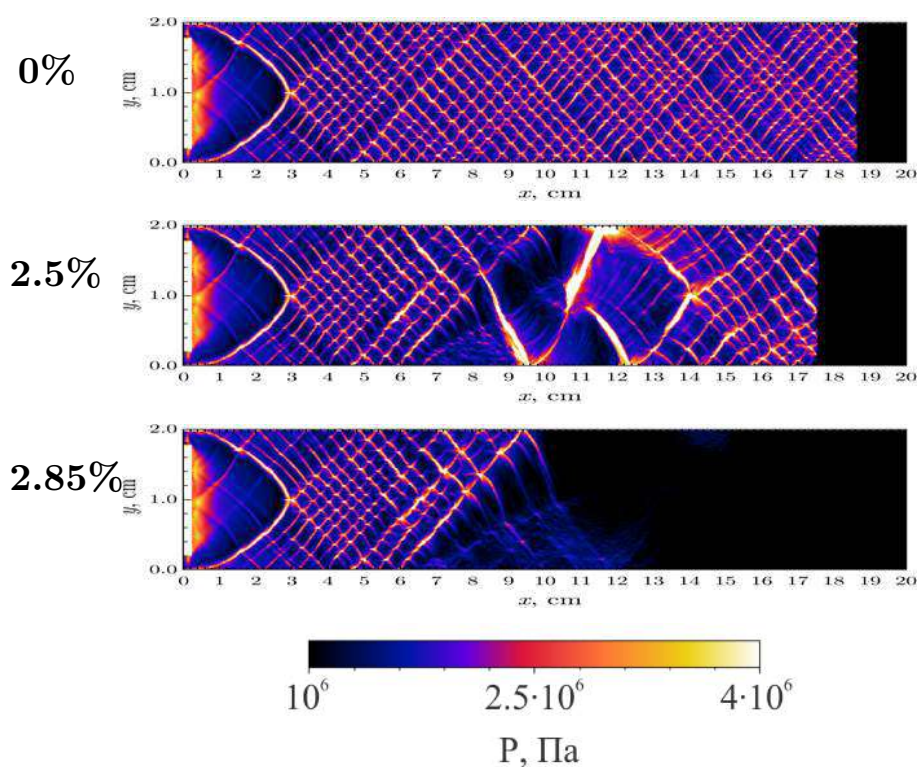


Рисунок 3.27 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 2.5 и 2.85 объемных процентов (Tereza r).

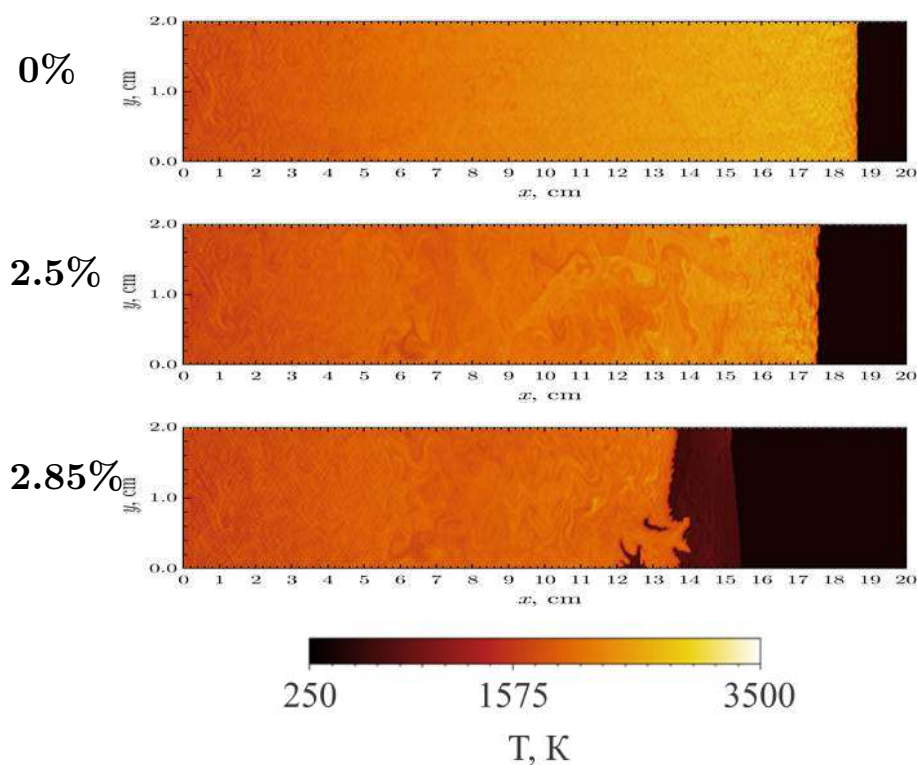


Рисунок 3.28 — Поля температуры на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 2.5 и 2.85 объемных процентов (Tereza r).

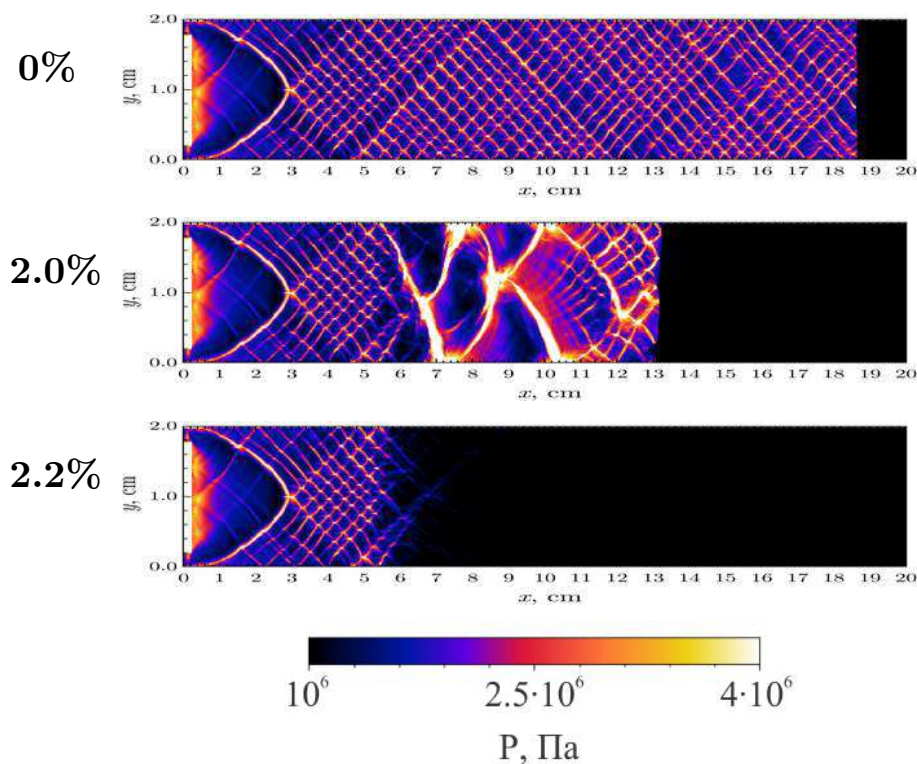


Рисунок 3.29 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 2.0 и 2.2 объемных процентов (Tereza).

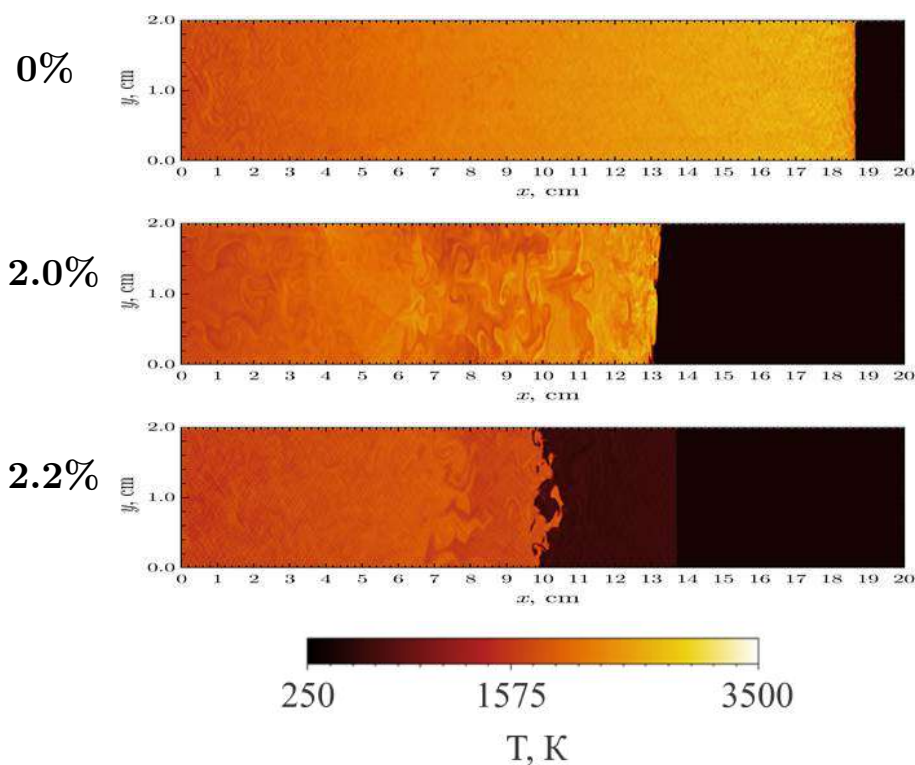


Рисунок 3.30 — Поля температуры на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 2.0 и 2.2 объемных процентов (Tereza).

детонация гаснет, равна 2.8%, тогда как с использованием расширенного механизма она несколько меньше и равна 2.4%.

Ниже представлены результаты расчетов для случая 5: $[\text{H}_2]:[\text{O}_2]:[\text{N}_2]:[\text{C}_3\text{H}_6] = 3:1:4:\alpha$, полученные с использованием сокращенного (рисунки 3.31-3.32) и расширенного (рисунки 3.33-3.34) кинетического механизма.

Для сравнения на рисунках 3.23-3.26 представлены результаты численного моделирования распространения детонации в стехиометрической смеси водорода с воздухом при различном содержании ингибитора (случай 3). Из рисунков 3.23-3.24 видно, что при сокращенном кинетическом механизме критическое содержание C_3H_6 для гашения детонации составляет 2.8%, в то время как при расширенном кинетическом механизме (рисунки 3.25-3.26) дает меньшее критическое содержание C_3H_6 для гашения детонации на 2.4%. Эти результаты показывают, что характерная ширина “серой зоны” для гашения детонации невелика при использовании различных кинетических механизмов для расчетов детонации.

Результаты сравнения различных кинетических механизмов для (случай 3)

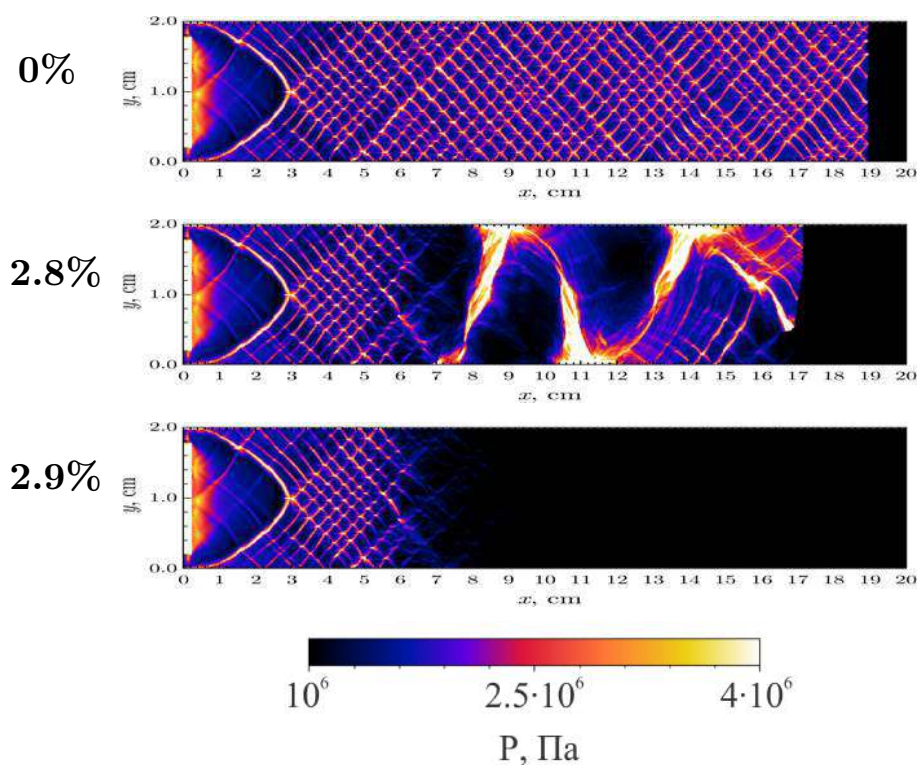


Рисунок 3.31 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 2.8 и 2.9 объемных процентов (Tereza r).

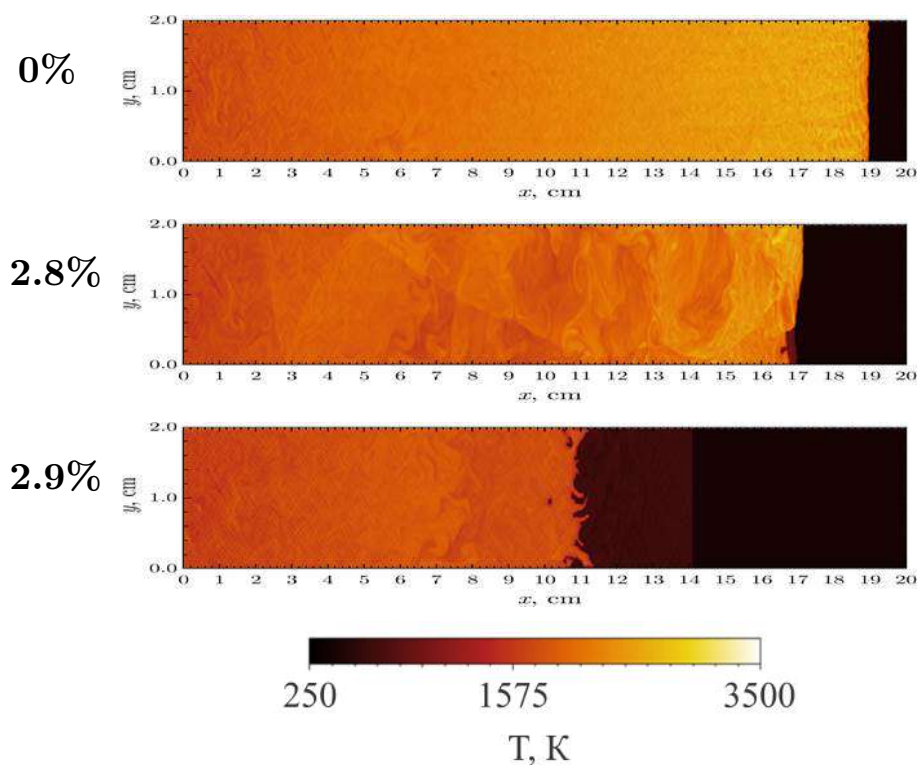


Рисунок 3.32 — Поля температуры на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 2.8 и 2.9 объемных процентов (Tereza r).

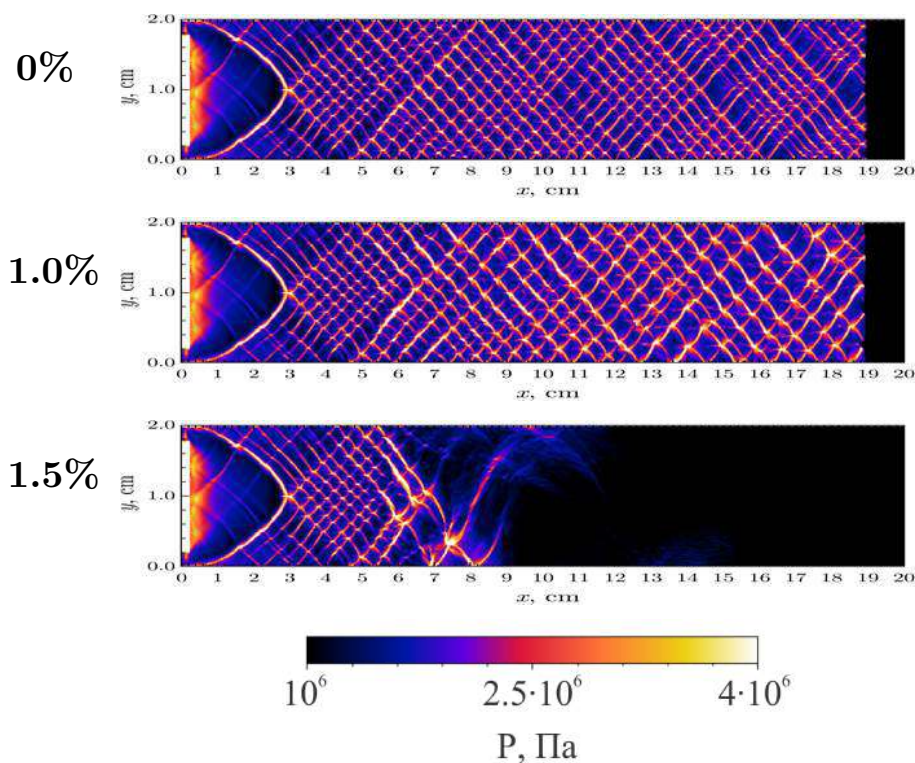


Рисунок 3.33 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 1.0 и 1.5 объемных процентов (Tereza).

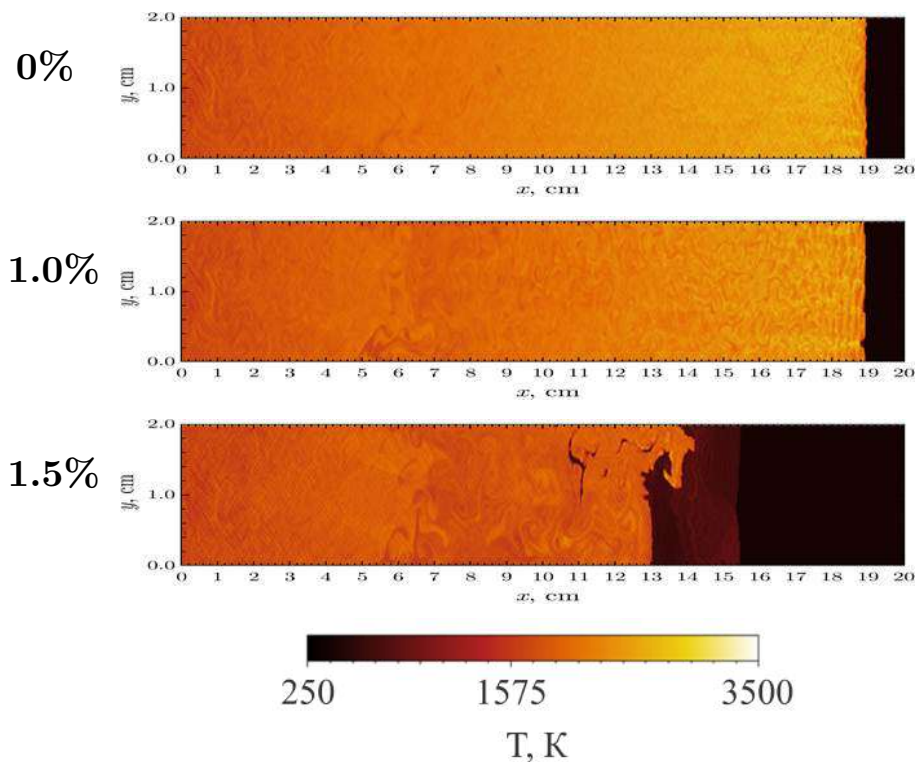


Рисунок 3.34 — Поля температуры на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 1.0 и 1.5 объемных процентов (Tereza).

На этих рисунках приведены распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области и поля температуры на момент времени 100 мкс.

Представленный материал позволяет сделать вывод о качественном согласии картин распределений давления и полей температуры, полученных с помощью сокращенного и расширенного механизма, но величины концентраций ингибитора, при которых детонация подавляется, в исследованной богатой смеси ($[H_2]:[O_2]:[N_2] = 3:1:4$), существенно отличается: 2.9% для сокращенного и 1.5% для расширенного механизма. Сравнение с экспериментом может пролить свет на достоверность результатов о критическом содержании ингибитора. Диапазон концентраций ингибитора между этими двумя значениями мы будем называть серой зоной.

Для сравнения на рисунках 3.23-3.26 представлены результаты численного моделирования распространения детонации в стехиометрической смеси водорода с воздухом при различном содержании ингибитора (случай 3). Из рисунков 3.23-3.24 видно, что при сокращенном кинетическом механизме критическое содержание C_3H_6 для гашения детонации составляет 2.8%, в то время как при расширенном кинетическом механизме (рисунки 3.25-3.26) дает меньшее критическое содержание C_3H_6 и составляет 2.4%. Эти результаты показывают, что характерная ширина “серой зоны” для гашения детонации невелика при использовании различных кинетических механизмов для расчетов детонации.

Результаты сравнения различных кинетических механизмов для (случай 3)

$[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6] = 2:1:4:\alpha$ можно считать согласованными, принимая во внимание нестабильный характер явления гашения ячеистой детонации. На процесс вырождения детонационной волны могут влиять неконтролируемые эффекты. В физических экспериментах это могут быть случайные нарушения параметров потока из-за некоторой неконтролируемой шероховатости стенок. В численных экспериментах неконтролируемые нарушения могут быть вызваны округлением ошибок или накоплением ошибок из-за усреднения параметров для конечного размера сетки.

Сравнивая расхождение между результатами, полученными с использованием сокращенного и расширенного кинетических механизмов, можно видеть, что для богатых смесей расхождение результатов при опре-

делении критической концентрации ингибитора между сокращенным и расширенным кинетическими механизмами увеличивается с увеличением концентрации водорода, в то время как для стехиометрических смесей критическое содержание ингибитора, для случая расширенного и сокращенного кинетических механизмов довольно близко.

Эти выводы побудили продолжить исследование в богатых смесях с использованием двух кинетических механизмов. Далее рассматриваются процессы для трех богатых смесей составов: Случаи 6, 7, 8. Ниже представлены результаты расчетов для случая 6: $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6] = 3.3:1:4:\alpha$, полученные с использованием сокращенного (рисунки 3.35-3.36) и расширенного (рисунки 3.37-3.38) кинетического механизма.

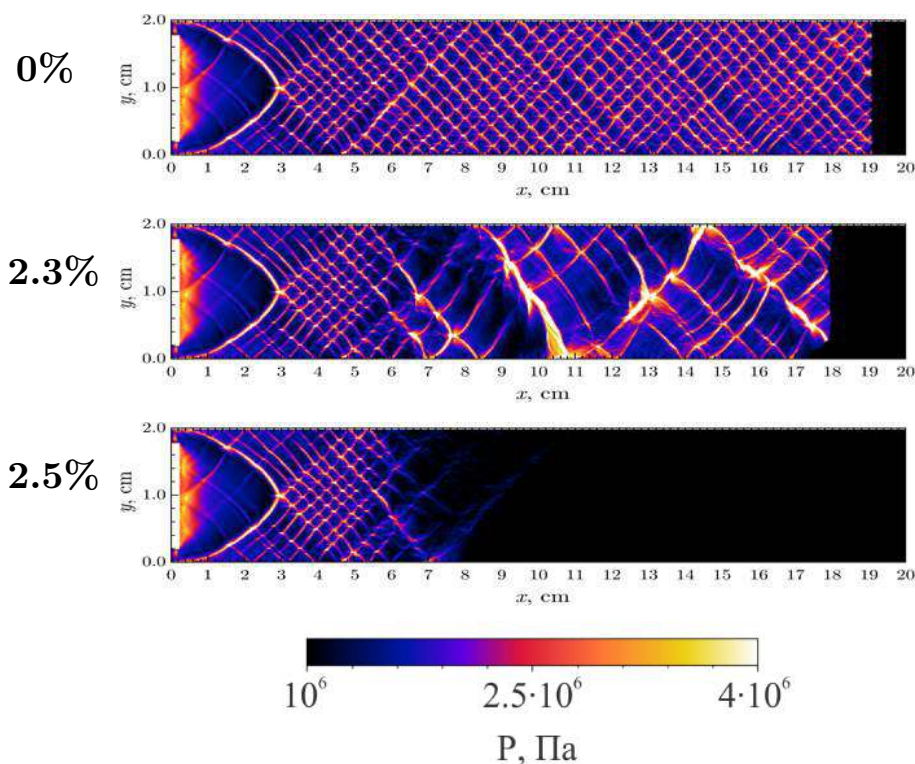


Рисунок 3.35 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 2.3 и 2.5 объемных процентов (Tereza r).

Ниже представлены результаты расчетов для случая 7: $[H_2]:[O_2]:[N_2]:[C_3H_6] = 53:1:4:\alpha$, полученные с использованием сокращенного (рисунки 3.39-3.40) и расширенного (рисунки 3.41-3.42) кинетического механизма.

Из рисунков 3.35-3.42 видно, что при увеличении концентрации водорода в богатых смесях требуется меньше ингибитора для гашения

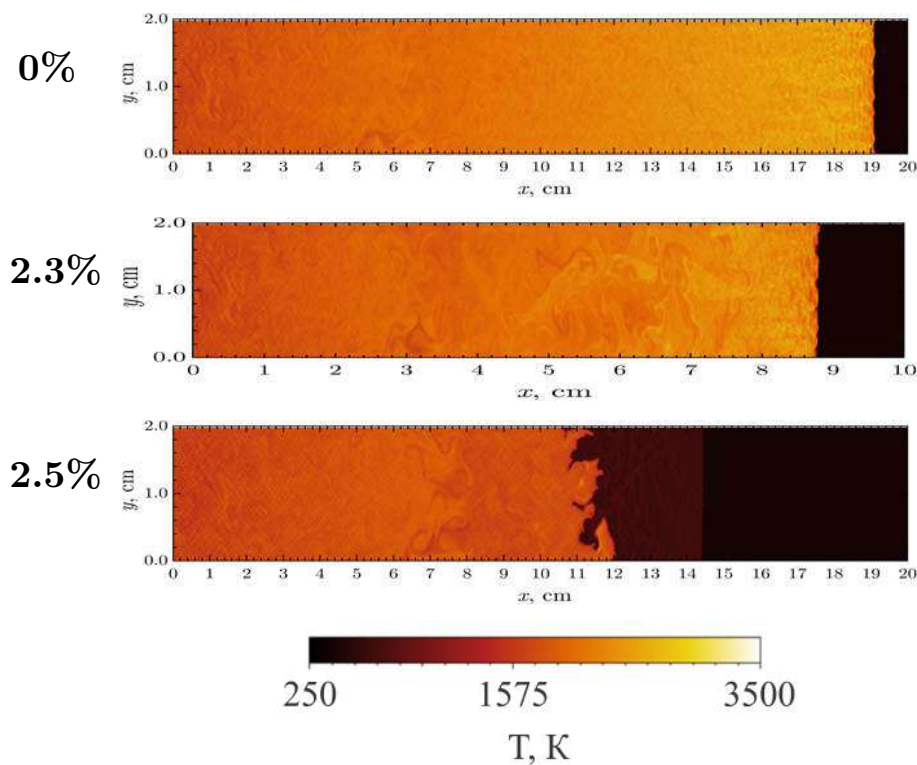


Рисунок 3.36 — Поля температуры на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 2.3 и 2.5 объемных процентов (Tereza r).

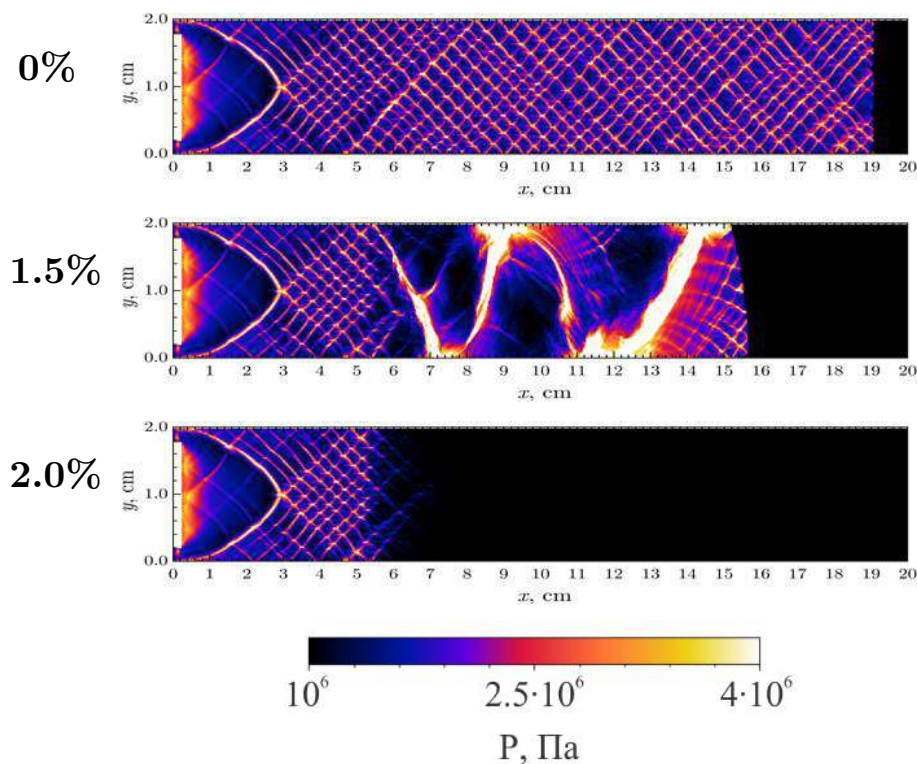


Рисунок 3.37 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 1.5 и 2.0 объемных процентов (Tereza).

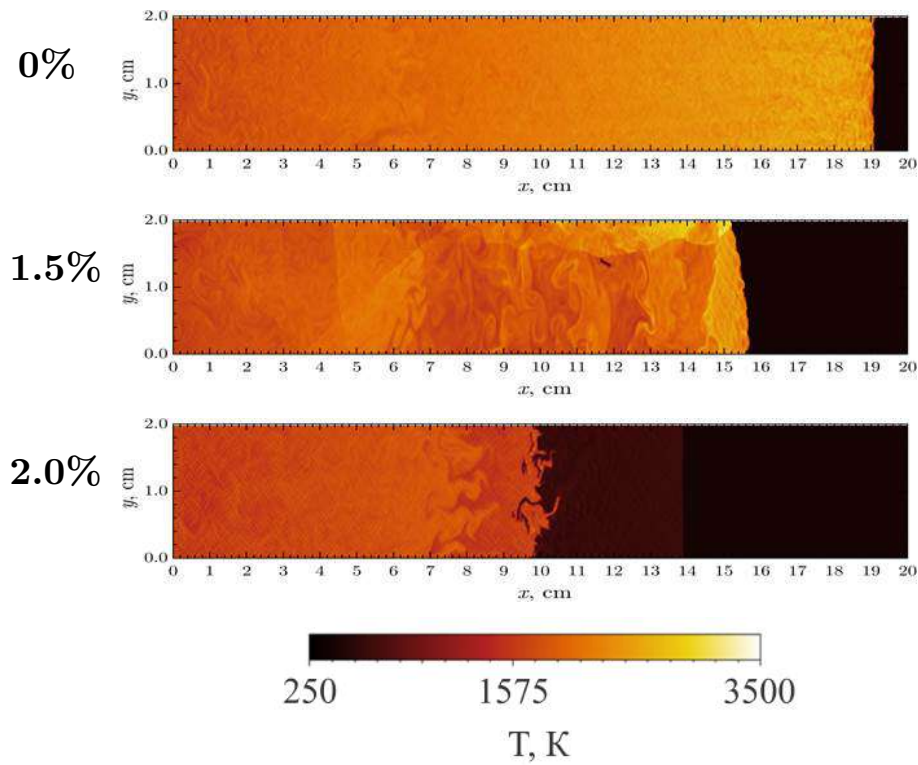


Рисунок 3.38 — Поля температуры на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 1.5 и 2.0 объемных процентов (Tereza).

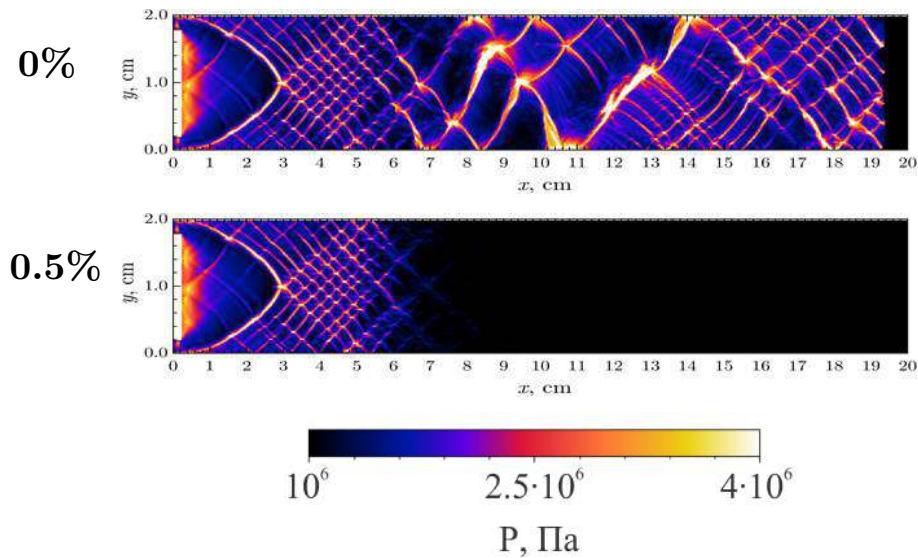


Рисунок 3.39 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 0.5 объемных процентов (Tereza r).

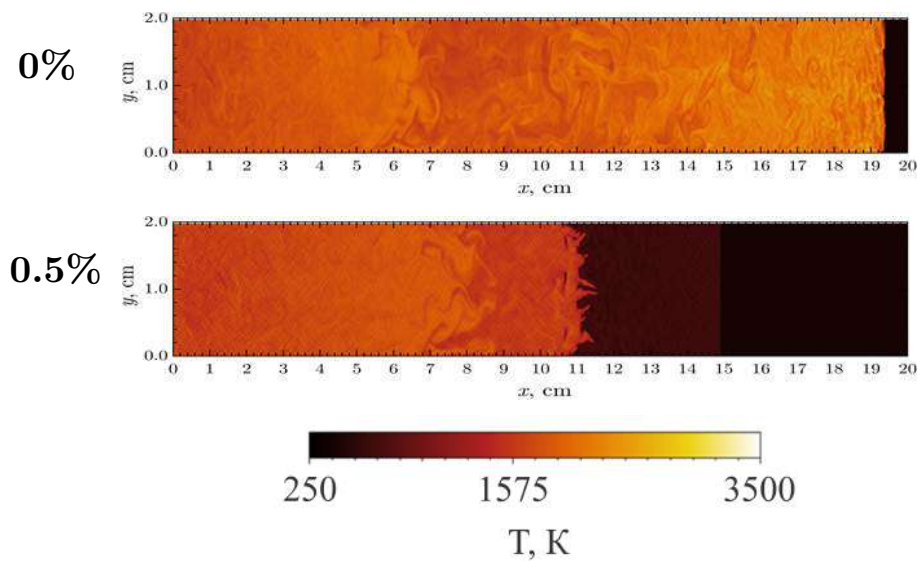


Рисунок 3.40 — Поля температуры на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 0.5 объемных процентов (Tereza r).

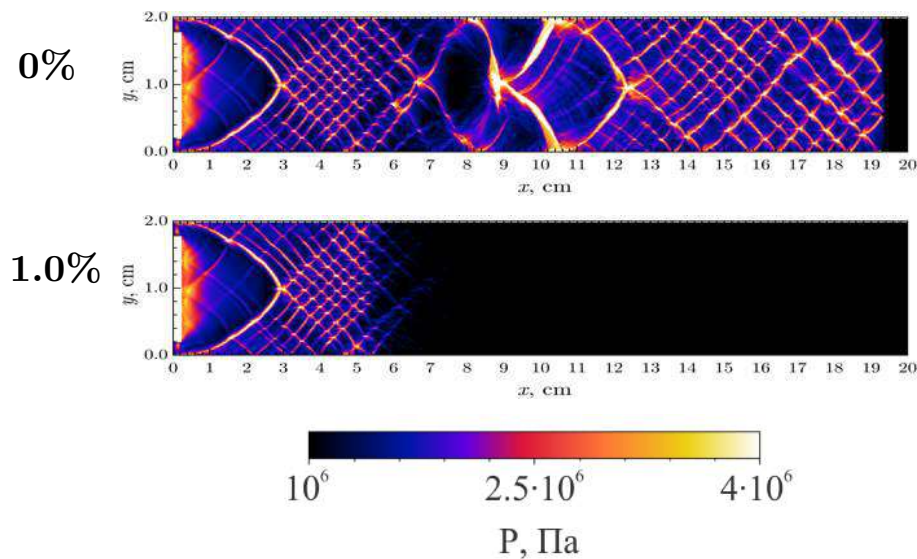


Рисунок 3.41 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 1.0 объемных процентов (Tereza).

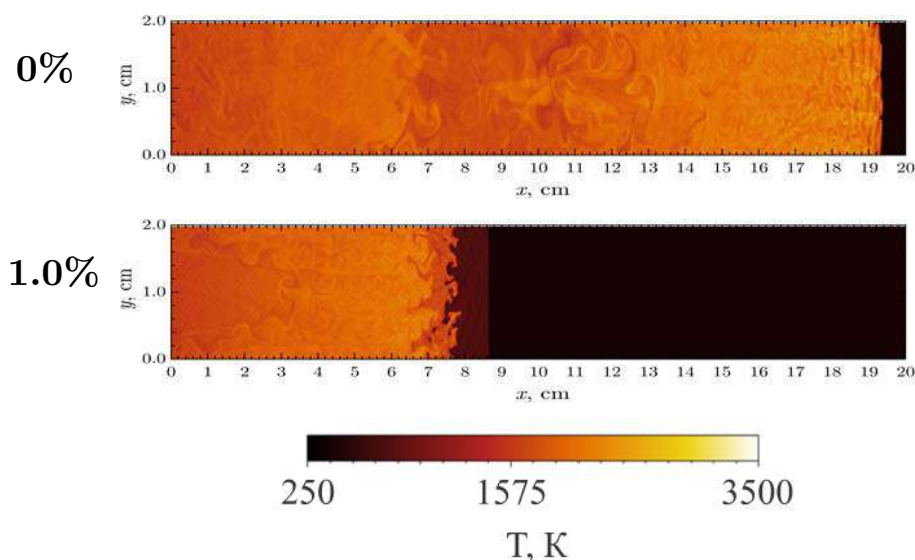


Рисунок 3.42 — Поля температуры на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0, 1.0 объемных процентов (Tereza).

детонационной волны. Результаты для сокращенного и расширенного кинетического механизма также свидетельствуют о снижении критического содержания ингибитора при увеличении концентрации водорода. Кроме того, в рассмотренном диапазоне содержания водорода уменьшается расхождение между результатами, полученными с использованием сокращенного и расширенного механизмов. Ниже представлены результаты расчетов для случая 8: $[\text{H}_2]:[\text{O}_2]:[\text{N}_2]:[\text{C}_3\text{H}_6]=5.8:1:4:\alpha$, полученные с использованием сокращенного (рисунок 3.43а) и расширенного (рисунок 3.43б) кинетического механизма.

Дальнейшее увеличение содержания водорода в смеси приводит к гашению детонации без использования какого-либо ингибитора (рисунок 3.43). Расхождение между результатами моделирования с использованием сокращенного и расширенного кинетических механизмов в этих условиях становится незначительным.

Все проведенные расчеты свидетельствуют о том, что использование нескольких процентов пропилена в водородно-воздушных смесях приводит к гашению детонационной волны.

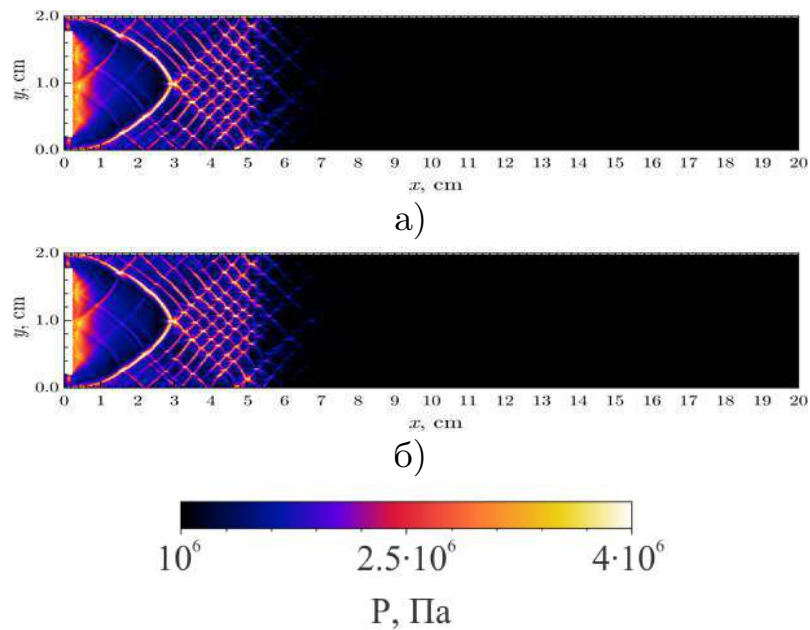


Рисунок 3.43 — Распределения максимальных значений давления, зафиксированных в точках расчетной области на момент времени 100 мкс при начальной температуре смеси 400 К и концентрациях пропилена: 0 объемных процентов: а) Сокращенный кинетический механизм (Tereza r); б) Расширенный кинетический механизм (Tereza). Исследовалась богатая смесь: $[\text{H}_2]:[\text{O}_2]:[\text{N}_2]=5.8:1:4$

3.4.4 Сравнение с экспериментальными данными

Обобщением результатов исследования задачи о подавлении ингибитором детонации в бедных и богатых водородно-воздушных смесях [II] является представленная на рисунке 3.44 диаграмма, на которой цветными сплошными линиями изображены кривые, аппроксимирующие зависимости критической концентрации ингибитора, достаточной для подавления детонации, от концентрации, полученные численно с использованием: сокращенного кинетического механизма (13 компонентов, 32 реакции, кривая 1) и расширенного кинетического механизма (58 компонентов, 404 реакции, кривая 2), а также экспериментально ([50; II], кривая 3). Кружочки - данные расчетов, использованные для аппроксимации.

Хорошо видно, что для бедных смесей получаются близкие результаты экспериментов и расчетов с использованием как сокращенного, так и

расширенного кинетического механизма, а для богатых смесей имеет место значительное расхождение. Для богатых смесей кривые демонстрируют качественно сходное поведение, несмотря на существенную количественную разницу. Для кривой с сокращенным кинетическим механизмом видно значительное расхождение с экспериментальными данными и для случая расширенного кинетического механизма в некотором диапазоне содержания водорода. Расхождение уменьшается как при увеличении содержания водорода в богатых смесях, так и при уменьшении содержания водорода в бедных смесях. Осюда следует, что сокращенный кинетический механизм может обеспечить надежные результаты для гашения детонации в бедных смесях и в очень богатых смесях, в то время как для умеренно богатых смесей предпочтителен расширенный кинетический механизм. Кроме того, для бедных и очень богатых смесей результаты по ингибированию детонации, полученные с помощью сокращенного кинетического механизма, оказались более близкими к экспериментам, чем результаты, полученные с использованием расширенного кинетического механизма.

Причиной различия результатов могут быть следующие обстоятельства. Эксперименты проводились в металлической трубке, на стенках которой происходит каталитическое подавление цепных реакций (расходуется атомарный водород). Таким образом, появляется другой источник стока атомарного водорода, отличный от ингибитора C_3H_6 . При численном моделировании этот сток не учитывался. Как было показано в работе [214], закономерности распространения пламени во многом зависят от характера и скорости гетерогенных реакций активных промежуточных частиц на стенках канала и, прежде всего, от интенсивности разрыва гетерогенной цепи. В свою очередь, пламя влияет на химические свойства поверхности. Из-за неизвестных констант скорости гетерогенных реакций и изменения состояния поверхности под воздействием пламени практически невозможно получить достоверные результаты численного исследования горения в условиях разрыва гетерогенной цепи.

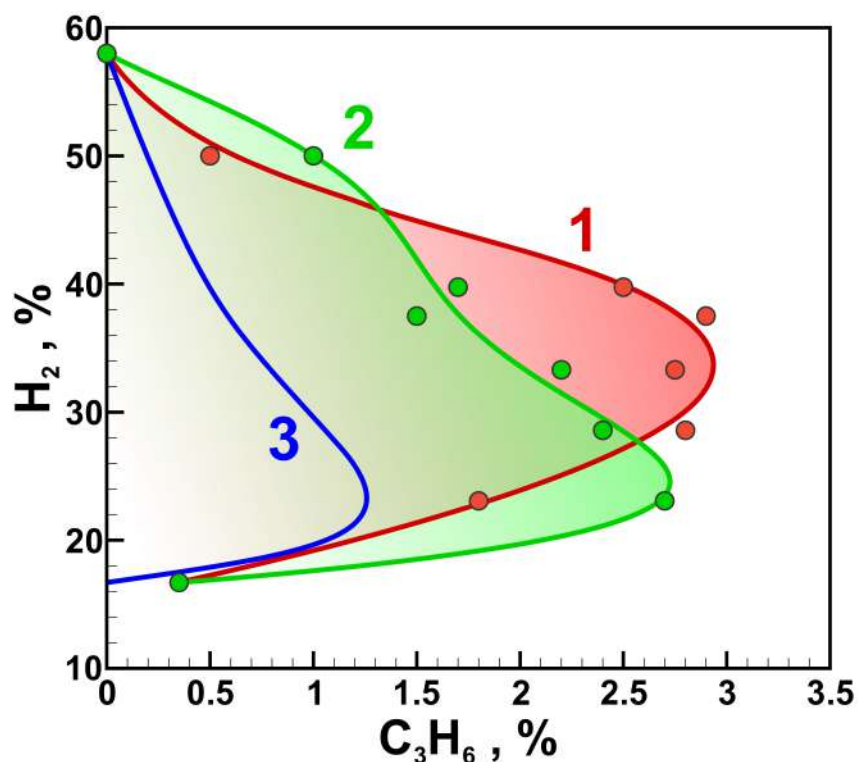


Рисунок 3.44 — Полуостров пределов детонации по концентрациям для водородно-воздушных смесей при начальной температуре 400 К и давлении 0.1 МПа. Кружочки - данные расчетов, использованные для аппроксимации, сплошная кривая 1 – критические концентрации ингибитора для подавления детонации, полученные при численном моделировании с использованием сокращенного 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 [50; II].

3.5 Выводы ко второй главе

Исследована концепция предотвращения возникновения и подавления детонационных волн в смесях водорода с окислителем путем добавления ингибитора. Таким ингибитором должно быть также топливо, обладающее особыми свойствами предотвращения детонации при смешивании с водородом, но не снижающее эффективность сгорания водородного топлива в режиме дефлаграции. В качестве ингибитора выбран пропен, который подавляет детонацию и может способствовать возникновению режима де-

флаграции. Этот углеводородный ингибитор обладает обоими свойствами: подавляет начало детонации в водородно-воздушной смеси и поддерживает стабильное горение в горелках различных типов. Пропелен может быть эффективно использован для обеспечения безопасности водородного топлива без снижения стабильности горения при использовании водорода в качестве топлива. Использование нескольких процентов пропилена в водородно-воздушных смесях приводит к гашению детонационной волны.

На основе математической модели развития ячеистой детонации при использовании кинетического механизма [197] было показано, что добавка пропилена C_3H_6 в стехиометрическую смесь водорода с воздухом надежно подавляет детонацию, вызванную мощным выделением энергии при концентрациях 3 и 4 объемных процента, и не подавляет при концентрациях 2% и ниже, что согласуется с экспериментальными выводами о влиянии добавки ингибитора на основе пропилена. Между 2% и 3% концентрации ингибитора по объему динамика подавления детонации зависит от начальной температуры газа, чем она выше, тем подавление эффективнее.

На основе результатов численных исследований построен полуостров детонации, иллюстрирующий критическое содержание ингибитора, достаточное для подавления детонации в смеси с различной концентрацией водорода в воздухе. Сравнивая расхождения между результатами, полученными с использованием сокращенной и расширенной кинетики, можно увидеть, что для бедных смесей и очень богатых смесей численное моделирование для сокращенной кинетики, расширенной кинетики и эксперимента дает довольно близкие результаты, в то время как для богатых смесей наблюдается значительное расхождение результатов. Кривые, соответствующие границе критического содержания ингибитора между смесью, в которой все еще возможно распространение детонации, и смесью, в которой детонация подавлена, для умеренно богатых смесей и стехиометрических смесей, демонстрируют количественные различия. При сравнении с экспериментом кривая, основанная на расширенном кинетическом механизме, демонстрирует качественно сходное поведение с экспериментальной кривой, несмотря на существенное количественное отличие, в то время как для сокращенного кинетического механизма кривая демонстрирует большее количественное отличие от экспериментальных данных. Это позволяет сделать вывод о том, что сокращенный кинетический механизм может обес-

печить надежные результаты гашения детонации в бедных смесях и в очень богатых смесях, в то время как для умеренно богатых и стехиометрических смесей предпочтителен расширенный кинетический механизм. Исследование вносит вклад в фундаментальное понимание процессов химического ингибирования детонации и предоставляет практические данные для разработки систем активной защиты.

Глава 4. ИССЛЕДОВАНИЕ ТРЕХМЕРНОГО КАНАЛА С НЕПРЕРЫВНОЙ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНОЙ НА СМЕСЯХ ВОДОРОД – КИСЛОРОД И АЦЕТИЛЕН – КИСЛОРОД

Настоящая глава посвящена постановке и численному решению трехмерной нестационарной задачи об иницировании, формировании и устойчивости вращающейся в канале детонационной волны

Значительная часть исследования посвящена анализу эффективности систем стабилизации детонации. В численных расчетах использовался оригинальный сокращенный кинетический механизм горения. Исследовалось влияние внешнего давления, размеров канала и условий поступления в канал горючей смеси и ее состава на параметры продуктов детонации. Достоверность полученных численных результатов подтверждается их сопоставлением с данными натурных экспериментов. Результаты данной главы опубликованы в статьях [III; IV; VI–VIII].

4.1 Математическая модель

Математическая модель состоит из системы дифференциальных уравнений массы, импульса и баланса энергии, модели турбулентности, алгебраических соотношений и уравнений состояния, начальных и граничных условий.

Для описания течения многокомпонентной газовой смеси с учетом химических превращений, эффектов переноса и турбулентности использовалась система уравнений в форме:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_k u_j) - \frac{\partial J_{k,j}}{\partial x_j} = \dot{\omega}_k \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{i,j}}{\partial x_j} = 0 \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial E_T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} ((E_T + p) u_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} (-J_{T,j} + u_i \tau_{i,j}) = \dot{Q} \quad (4.3)$$

В этой системе: k – номер компонента смеси, ρ_k – парциальная плотность, $J_{k,j}$ компонента вектора диффузионного потока, $\dot{\omega}_k$ интенсивность образования компонента в химических реакциях, ρ плотность газовой смеси, u_j компонента вектора скорости, p давление, $\tau_{i,j}$ компоненты девиатора тензора напряжений, E_T полная внутренняя энергия единицы объема: сумма тепловой, химической, кинетической и турбулентной энергии смеси, $J_{T,j}$ компоненты вектора потока тепловой и химической энергии, $\dot{Q}$ интенсивность притока тепловой энергии из внешнего источника, без учета энергии, поступающей с добавляемой массой.

Индекс k пробегает значения $1 \dots N_C$ (перечень компонентов), индексы i, j значения $1, 2, 3$ (перечень координат); по повторяющимся индексам ведется суммирование. Всего в трехмерной системе $N_C + 4$ уравнения, не считая уравнений модели турбулентности. Последняя определяет потоки переноса $J_{k,j}$ и $J_{T,j}$, а также тензор напряжений смеси, в виде суммы шаровой части и девиатора как $(-p\delta_{i,j} + \tau_{i,j})$. В том случае, когда турбулентность не учитывается, p представляет собой статическое давление.

$$\begin{aligned}\rho &= \sum_{k=1}^{N_C} \rho_k \\ Y_k &= \frac{\rho_k}{\rho} \\ X_k &= \frac{\rho_k}{W_k}\end{aligned}\tag{4.4}$$

Здесь Y_k — массовая доля компонента k , X_k — молярная плотность, W_k — масса моля компонента.

Давление p определенное как шаровая часть тензора напряжений получается из термодинамического давления $\tilde{p}$ добавкой, возникающей от воздействия хаотических пульсаций скорости:

$$\begin{aligned}p &= \tilde{p} + \frac{2}{3}\rho K \\ \tilde{p} &= R_G T \sum_{k=1}^{N_C} X_k\end{aligned}\tag{4.5}$$

$$\begin{aligned}E_T &= E + \rho \frac{u^2}{2} + \rho K \\ u^2 &= u_j u_j\end{aligned}\tag{4.6}$$

Полная внутренняя энергия единицы объема определяется как сумма:

$$E = \sum_{k=1}^{N_C} X_k E_k(T) = R_G T \sum_{k=1}^{N_C} X_k \cdot \left(\hat{H}_k(T) - 1 \right) \quad (4.7)$$

Здесь, E_k внутренняя энергия единицы моля компонента, $\hat{H}_k(T)$ безразмерная энтальпия компонента, включающая в себя энтальпию формирования компонента при заданной температуре T_{ref} (химическая энергия). Эти функции температуры представляют собой основную часть описания свойств конкретных компонентов, и для многих веществ затабулированы или аппроксимированы полиномами. Данные о них и формат данных описан в руководствах [193] и [205].

В текущем исследовании химические источники массы $\dot{\omega}_k$ вычислялись как в предыдущей главе по формуле (3.7).

В данном исследовании используется модель турбулентности Уилкокса $k - \omega$ [215].

$$\frac{\partial \rho K}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho K u_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\mu + \sigma^* \mu_T) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right) = \tau_{i,j}^T \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta^* \rho K \omega \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial \rho \omega}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \omega u_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\mu + \sigma \mu_T) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) = \alpha \frac{\omega}{K} \tau_{i,j}^T \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta \rho \omega^2 \quad (4.9)$$

Здесь K кинетическая энергия турбулентных пульсаций на единицу массы, μ молекулярная вязкость газовой смеси, μ_T турбулентная (или вихревая) вязкость, $\tau_{i,j}^T$ турбулентная составляющая девиатора тензора напряжений, ω интенсивность убывания (диссипации) турбулентной энергии вдали от препятствий и в случае отсутствия источников пополнения этой энергии, α , σ , σ^* , β , β^* параметры модели Уилкокса:

$$\sigma = \sigma^* = \frac{1}{2} \quad \alpha = \frac{5}{9} \quad \beta = \frac{3}{40} \quad \beta^* = \frac{9}{100} \quad (4.10)$$

Вихревая вязкость μ_T определяется с помощью турбулентных параметров как:

$$\mu_T = \rho \frac{K}{\omega} \quad (4.11)$$

а турбулентная часть отклонения тензора напряжений определяется как:

$$\tau_{i,j}^T = \rho \frac{K}{\omega} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_s}{\partial x_s} \delta_{i,j} \right) \quad (4.12)$$

Молекулярная вязкость газовой смеси рассчитывается с использованием вязкости компонент и молярной плотности как:

$$\mu = \frac{\sum_{k=1}^{N_C} X_k \mu_k(T)}{\sum_{j=1}^{N_C} X_j \phi_{k,j}(T)} \quad (4.13)$$

Формула (4.13) показывает, что эффективная вязкость смеси ниже средневзвешенной из-за коэффициентов взаимности $\phi_{k,j}$. Простой метод определения коэффициентов взаимности опубликован в [206]:

$$\phi_{k,j} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{W_k}{W_j} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 + \left(\frac{\mu_k}{\mu_j} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{W_j}{W_k} \right)^{\frac{1}{4}} \right)^2 \quad (4.14)$$

Молекулярная вязкость рассчитывается с использованием физических молекулярных констант: массы, эффективного диаметра столкновения, параметров потенциала Леннарда-Джонса, дипольного момента, потенциала Штокмайера, а затем интерполируется с помощью простого выражения для данного температурного интервала. Для расчета потоков массы $J_{k,j}$, энергии $J_{T,j}$ и девиатора тензора напряжений $\tau_{i,j}$ использовалась модель, учитывающая турбулентный перенос, рассчитанный с помощью модели Уилкокса [215]. В большинстве случаев турбулентный перенос превосходит молекулярный, а последний рассчитывается с использованием упрощенной техники: чисел Прандтля $\mathbf{Pr}$ и Шмидта $\mathbf{Sc}$.

$$J_{k,j} = \left(\frac{\mu}{\mathbf{Sc}} + \frac{\mu_T}{\mathbf{Sc}_T} \right) \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad (4.15)$$

$$J_{T,j} = \left(\frac{\mu}{\mathbf{Pr}} + \frac{\mu_T}{\mathbf{Pr}_T} \right) \frac{\partial h}{\partial x_j} + (\mu + \mu_T) \frac{\partial K}{\partial x_j} \quad (4.16)$$

$$\tau_{i,j} = (\mu + \mu_T) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_s}{\partial x_s} \delta_{i,j} \right) \quad (4.17)$$

Здесь, $\mathbf{Sc}_T$, $\mathbf{Pr}_T$ - постоянные турбулентные числа Шмидта и Прандтля, $h = H/\rho$ энтальпия на единицу массы, $\delta_{i,j}$ символ Кронекера. Энтальпия на единицу объема вычисляется следующим образом:

$$H = R_G T \sum_{k=1}^{N_C} X_k \hat{H}_k(T) \quad (4.18)$$

Граничные и начальные условия

При исследовании таких задач, использовались три типа граничных условий: стенка, втекание (дозвуковое и сверхзвуковое) и вытекание (также дозвуковое и сверхзвуковое). Условия на стенке определяются её непроницаемостью (нормальная компонента скорости равна нулю), отсутствием химического взаимодействия со стенками (диффузионные потоки на стенке равны нулю), а также условиями для силы сопротивления и теплового потока на стенке с использованием пристенных функций турбулентной модели. Эти пристенные функции преобразуют условие прилипания на стенке в условие для силы сопротивления, а тепловой поток определяется заданной температурой стенки и касательной скоростью вблизи стенки. Кроме того, пристенные функции задают условия для турбулентных параметров в центрах ячеек, прилегающих к стенке. Пристенные функции и их влияние на граничные условия взяты из моделей, описанных в литературе [216—219].

Условия для втекания газовой смеси из отверстий на торце канала и на его боковых стенках определяются температурой торможения, давлением торможения и концентрацией компонентов. Предполагается, что смесь ускоряется адиабатически из состояния торможения до скорости звука, которая достигается на поверхностях втекания. В результате этого ускорения давление и температура на поверхностях втекания снижаются по сравнению с их тормозными значениями. Если давление в ячейке, соседней с поверхностью втекания, оказывается выше значения давления торможения, поток блокируется, и вместо этого применяются условия стенки. Условия вытекания представляют собой условия свободного течения: поток через границу расчётной области определяется условиями в ближайшей ячейке, если течение сверхзвуковое. Если же течение дозвуковое, то для определения потоков используется заданное условие внешнего давления; метод решения AUSM-plus позволяет непосредственно реализовать это условие.

Начальные условия в канале задаются фиксированными давлением, температурой и концентрациями компонентов. Начальная скорость принимается равной нулю, а в качестве начального газа задаётся воздух (кислородно-азотная смесь).

4.2 Постановка задачи

Рассматривается трехмерная область течения в форме канала между двумя непроницаемыми внешним и внутренним коаксиальными цилиндрами конечной длины, схематически изображенная на рисунке 4.1. Внешний цилиндр имеет постоянный радиус, а внутренний состоит из цилиндра постоянного радиуса и сопряженного с ним конуса. Слева зазор закрыт плоским кольцом с отверстиями (форсунками), снабженными клапанами, которые предназначены для управления поступлением в зазор горючей смеси, называемый 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.

Предполагается, что в начальный момент времени $t = 0$ в канале находится неподвижный воздух состава $[O_2]: [N_2] = 1:4$ с заданными давлением P_0 и температурой T_0 , и в зазор начинает поступать горючая смесь с давлением торможения 15 бар и температурой 258 К через основную систему впрыска, либо (и) через форсунки на внешнем и (или) внутреннем цилиндрах, но с давлением торможения 10 бар и температурой 258 К (в любых комбинациях трех систем впрыска).

Для расчета скорости и термодинамических параметров поступающей в зазор через форсунку горючей смеси использовалась элементарная теория сопла Лавала. Предполагалось, что форсунка состоит из элементарных сопел Лавала, число которых равно числу расчетных ячеек, покрывающих отверстие форсунки. Поэтому, параметры поступающей через элементарное сопло смеси вычислялись по известным формулам, используя давление торможения P^* и статическое давление P_3 в зазоре около отверстия элементарного сопла. В зависимости от соотношения величин P^* и P_3 реализуется

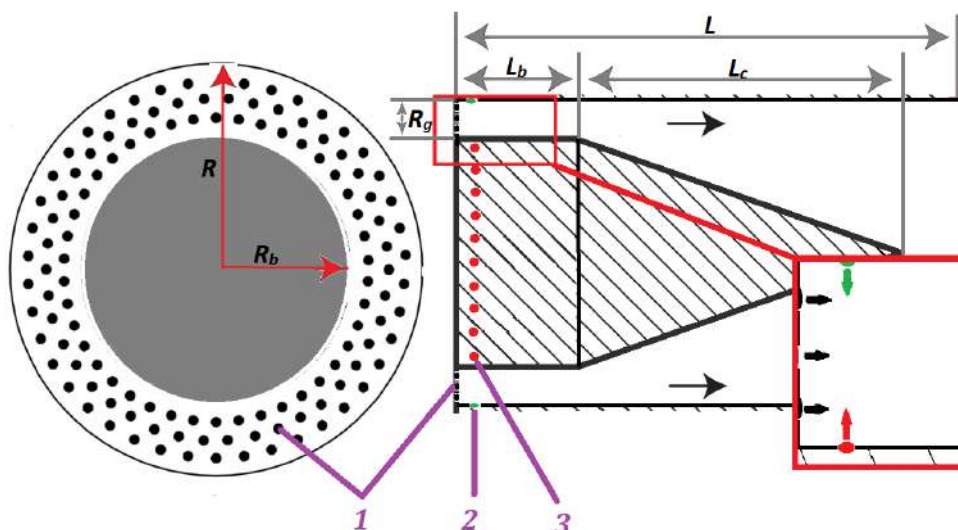


Рисунок 4.1 — Схема, иллюстрирующая постановку задачи: две проекции области течения, совпадающие с расчетной областью, 1 - основная система впрыска, 2 - форсунки на внешнем цилиндре, 3 - форсунки на внутреннем цилиндре. L -длина канала, L_c -высота конуса внутреннего тела, L_b - высота цилиндра внутреннего тела, R – радиус канала, R_b – радиус внутреннего тела, R_g – ширина кольцевого канала.

одна из трех возможностей. Если $P^* < P_3$, то клапан закрыт, поэтому, как и при $P^* = P_3$ смесь не втекает, если $P^* > P_3$, то параметры втекающей смеси вычисляются по известным формулам и равны критическим параметрам в горле сопла, если P^* меньше критического давления.

Инициирование вращающейся детонации производилось подводом внешним источником энергии. Подвод энергии $Q = 20$ кВ/мм³ осуществлялся в сферический объем заданного радиуса $r_{ign} = 2.5$ мм и включался через 10 мкс после начала подачи горючей смеси и продолжался 1 мкс. Для запуска одной детонационной волны, вращающейся в заданном направлении, инжекторы открывались не одновременно, а по очереди, в зависимости от угловой координаты их центров в цилиндрической системе координат, так что первые отверстия открывались в момент $t = 0$, а последние - в момент $t = 30$ мкс. На рисунке 4.2 показано схема и распределение концен кводорода к моменту времени 10 мкс непосредственно перед зажиганием. Детали реализации численного алгоритма представлены в Приложении А.1.

Из рисунка 4.2 видно, что благодаря последовательному открытию отверстий топливо заполняет только часть пространства между коакси-



Рисунок 4.2 — Распределение топлива за 10 мкс, непосредственно перед зажиганием. Стехиометрическая смесь.

альными цилиндрами. Воспламенение происходит в начале этой последовательности, на границе области, заполненной топливом (В цилиндрической системе координат (r, φ, z) с началом на торцевой стенке на оси канала источник инициирования помещён в кольцевой зазор между внутренним цилиндром радиуса R_b и внешним цилиндром радиуса R . Координаты источника: $r = (R - R_b)/2$ (середина зазора), $\varphi = 0$, $z = 5$ мм (на расстоянии 5 мм от торца)), и сформированная детонационная волна распространяется в одном направлении а обратная ударная волна распространяется в противоположном направлении из-за недостатка топлива.

4.3 Верификация программного кода

Ниже представлены результаты верификации программного кода. В вычислительной области использовалась регулярная сетка из однородных кубических расчетных ячеек. В рассматриваемом случае рабочая область содержала более 9 миллионов ячеек. Части программы, требующие больших затрат времени, были распараллелены с использованием технологии OpenMP. Для верификации программного кода были выполнены три расчета, отличавшиеся только размером расчетной ячейки. Расчеты проводились для водородно-воздушной богатой смеси ($[H_2]:[O_2] = 3:1$) с давлением тор-

можения 15 бар и температурой 258 К подаваемой из основной системы впрыска.

На рисунке 4.3 показано поле давления в поперечных сечениях Oxz и Oyz для различных размеров ячеек расчетной сетки Δx : 0.5 мм, 0.25 мм, 0.125 мм, на момент времени 40 мкс. Качественно картины полей хорошо согласуются для 0.25 мм и 0.125 мм и немного отличаются для случая с самой крупной сеткой 0.5 мм. Следует заметить, что согласно предыдущим расчетам в главах 3-4 размер детонационной ячейки составлял для такой смеси от 0.3 до 0.6 см. Таким образом получалось разрешение детонационной ячейки, для ячейки с минимальным размером покрывалась расчетными ячейками от 6×6 до 24×24 расчетных ячеек т.е. обеспечивалось разрешение ячеистой структуры детонации, как это требуется при решении данного класса задач.

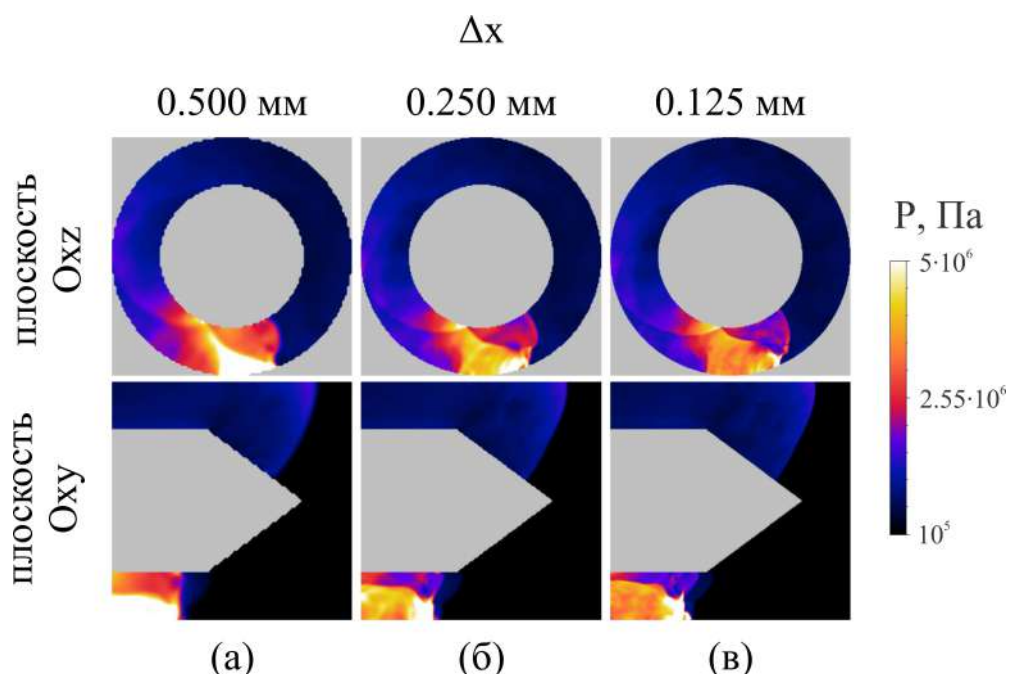


Рисунок 4.3 — Поле давления в поперечных сечениях Oyz и Oxz для различных размеров расчетной ячейки: (а) 0.5 мм, (б) 0.25 мм, (в) 0.125 мм.

На этом рисунке хорошо видно, что положения как ведущей, так и обратной ударной волны, распространяющейся в противоположном направлении, практически одинаковы. Однако расчеты с использованием более мелкой сетки позволяют выявить более мелкие детали отражения волны и получить более четкие ударные волны.

На рисунке 4.4 показана зависимость давления в виртуальном датчике от времени. Давление в датчике для ячеек размером 0.25 мм немного выше, давления для ячеек размером 0.125 мм.

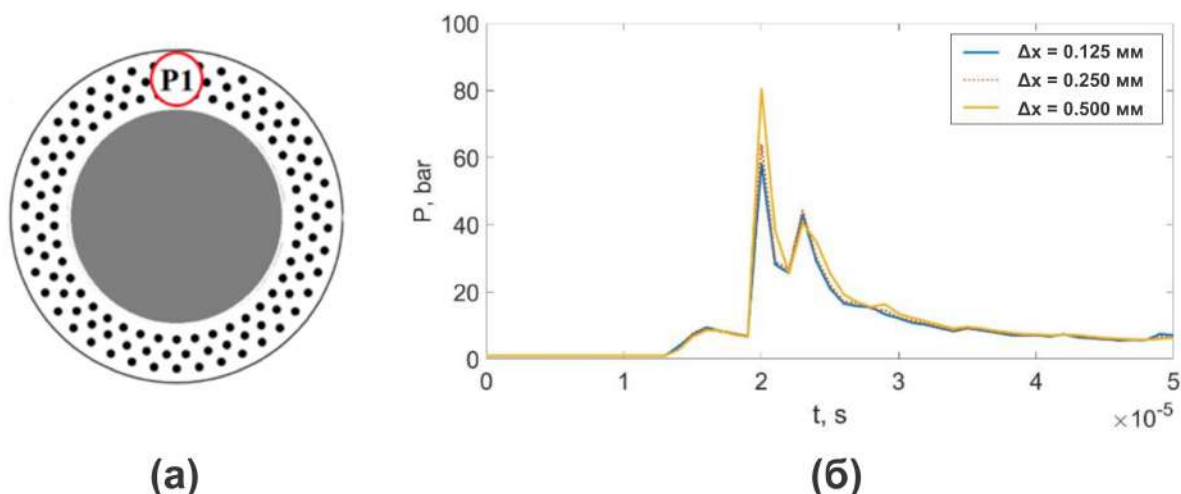


Рисунок 4.4 — Расположение “виртуального датчика” (а), зависимость давления от времени в виртуальном датчике (б).

4.4 Влияние на детонацию избытка и недостатка окислителя в смеси водорода с кислородом

Далее представлены результаты расчетов с тремя видами смеси: бедная смесь (молярное отношение $[H_2]:[O_2] = 1:1$), стехиометрическая смесь ($[H_2]:[O_2] = 2:1$), и богатая смесь ($[H_2]:[O_2] = 3:1$). В начальный момент канал был заполнен воздухом ($[O_2]:[N_2] = 1:4$) с давлением 1 бар и температурой 300 К.

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 расчетной области: длина внешнего цилиндра 10 см, а его диаметр 5 см, длина внутреннего цилиндра 10 см, его диаметр 3 см. Количество отверстий в основной системе впрыска 72, а радиус отверстия 1.5 мм. Количество отверстий на внешнем цилиндре 28, а на внутреннем 24, их радиус 2 мм. Горючая смесь подавалась из основной системы (рисунок 4.16(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 4.16(2,3)). В начальном состоянии в канале воздух ($[O_2]:[N_2] = 1:4$) с давлением 1 бар и температурой 300 К.

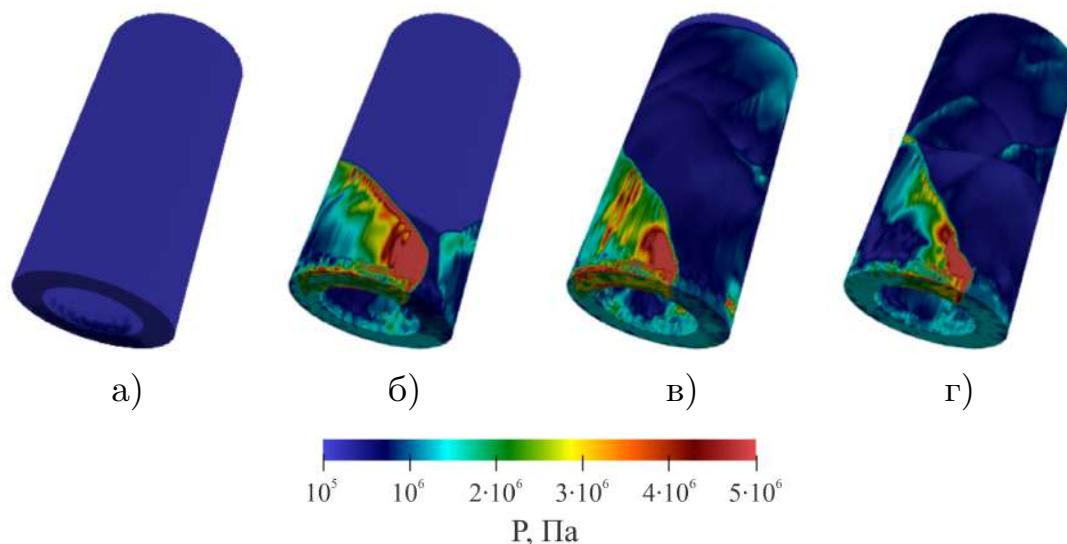


Рисунок 4.5 — Поле давления в различные моменты времени: а) $t = 10$ мкс, б) $t = 50$ мкс, в) $t = 100$ мкс, г) $t = 150$ мкс для бедной смеси.

На рисунке 4.5 показано трехмерное поле давления в моменты времени 10, 50, 100, 150 мкс для бедной смеси ($[\text{H}_2]:[\text{O}_2] = 1:1$).

Непосредственно перед воспламенением (рисунок 4.5а) давление немного увеличивается вблизи форсунок. При 50 мкс (рисунок 4.5б) детонационная волна видна вместе с приближающейся к ней обратной ударной волной. При 100 мкс (рисунок 4.5в) детонационная волна прошла оборот, а впереди виден трехмерный взрыв во взрыве. Через 150 мкс (рисунок 4.5г) волна прошла еще один оборот в канале, стала слабее, но имеет более регулярную структуру. Видны спиральные следы у выхода из канала, связанные с ударными волнами в продуктах сгорания.

На рисунке 4.6 показана динамика температуры для той же бедной смеси.

Так, рисунок 4.6а соответствует состоянию смеси до ее воспламенения. На момент времени 50 мкс (рисунок 4.6б) уже сформировалась детонационная волна, о чем свидетельствует порождаемая ею высокотемпературная зона продуктов детонации. При 100 мкс (рисунок 4.6в) горячие продукты сгорания (желтого цвета) заполняют область у торца канала, а ударные волны приближаются к противоположной стороне (они нагревают газ, о чем свидетельствует красный цвет температурного поля). Через 150 мкс (рисунок 4.6г) продукты сгорания начинают покидать канал. Область холодной свежей горючей смеси, расположенная вблизи места впрыска, на рисунке

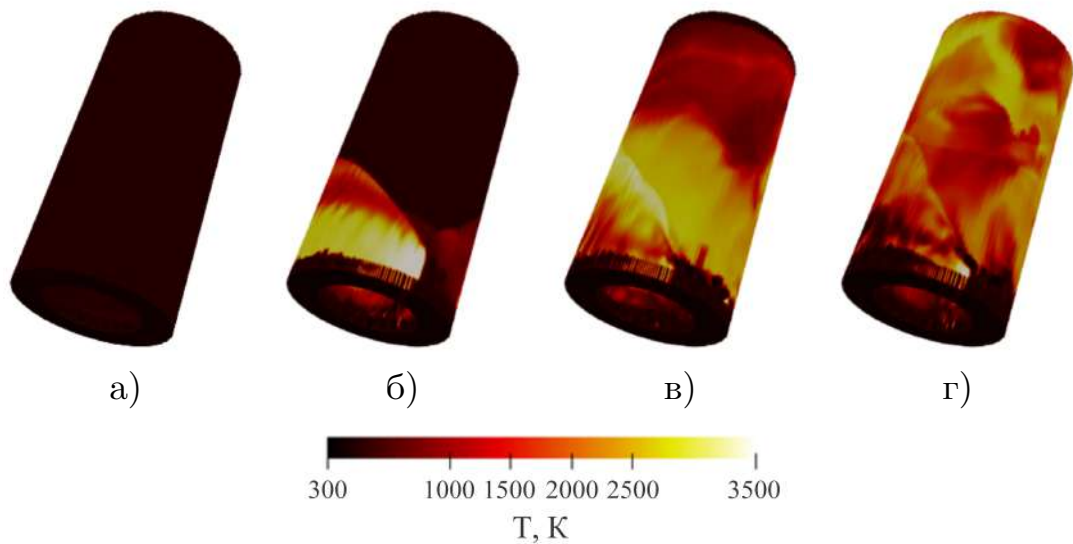


Рисунок 4.6 — Поля температуры в различные моменты времени: а) $t = 10$ мкс, б) $t = 50$ мкс, в) $t = 100$ мкс, г) $t = 150$ мкс для бедной смеси.

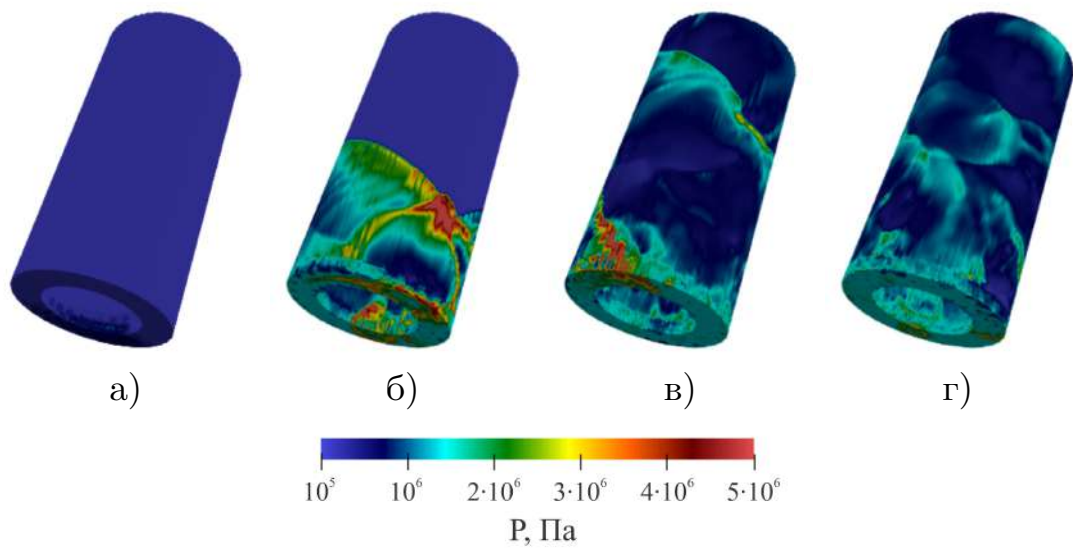


Рисунок 4.7 — Поля давления в различные моменты времени: а) $t = 10$ мкс, б) $t = 50$ мкс, в) $t = 100$ мкс, г) $t = 150$ мкс. Стехиометрическая смесь.

отображается черным цветом. Спиральные структуры на полях температуры не так заметны и регулярны, как на полях давления.

На рисунках 4.7 и 4.8 показаны поля давления и температуры для стехиометрической смеси ($[H_2]:[O_2] = 2:1$) в моменты времени 10, 50, 100 и 150 мкс.

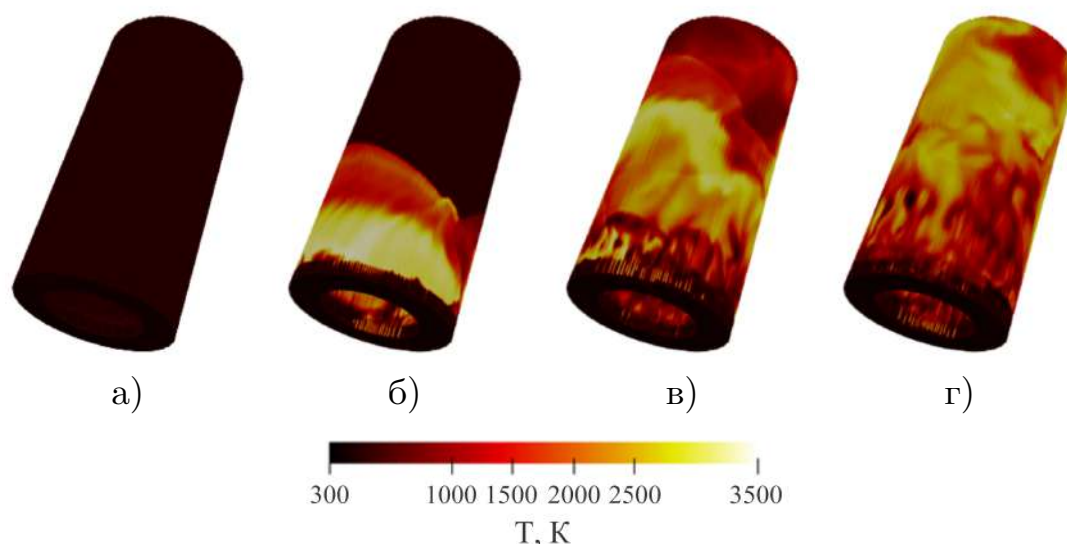


Рисунок 4.8 — Поля температуры в различные моменты времени: а) $t = 10$ мкс, б) $t = 50$ мкс, в) $t = 100$ мкс, г) $t = 150$ мкс. Стехиометрическая смесь.

Видно, что для стехиометрической смеси детонационная волна при 50 мкс разбивается на несколько волн, и они значительно слабее, чем для бедной смеси. Фокусировка ударных волн может быть замечена около середины канала (рисунок 4.76). Далее к моменту времени $t = 150$ мкс интенсивность волны ослабевает и структура становится менее регулярной. Что касается поля температуры (рисунок 4.8), то оно представляется более размытым, чем для бедной смеси, показанного на рисунке 4.6. Это поведение можно объяснить более высокой химической чувствительностью стехиометрических смесей к изменениям давления, что приводит к формированию большого числа дополнительных точек воспламенения, которые выжигают горючую смесь и тем самым ослабляют основную вращающуюся детонационную волну, что проявляется в уменьшении пиков давления.

Эволюция параметров богатой смеси показана на рисунке 4.9 (давление) и 4.10 (температура). Содержание богатой смеси: $[\text{H}_2]:[\text{O}_2] = 3:1$

Для богатой смеси, как и для бедной, структура полей давления и температуры относительно регулярна. На поле давления видна детонационная волна, которая в момент времени 50 мкс имеет нечеткую структуру из-за столкновения с обратной ударной волной. В последующие моменты времени наблюдается более выраженная структура детонационной волны.

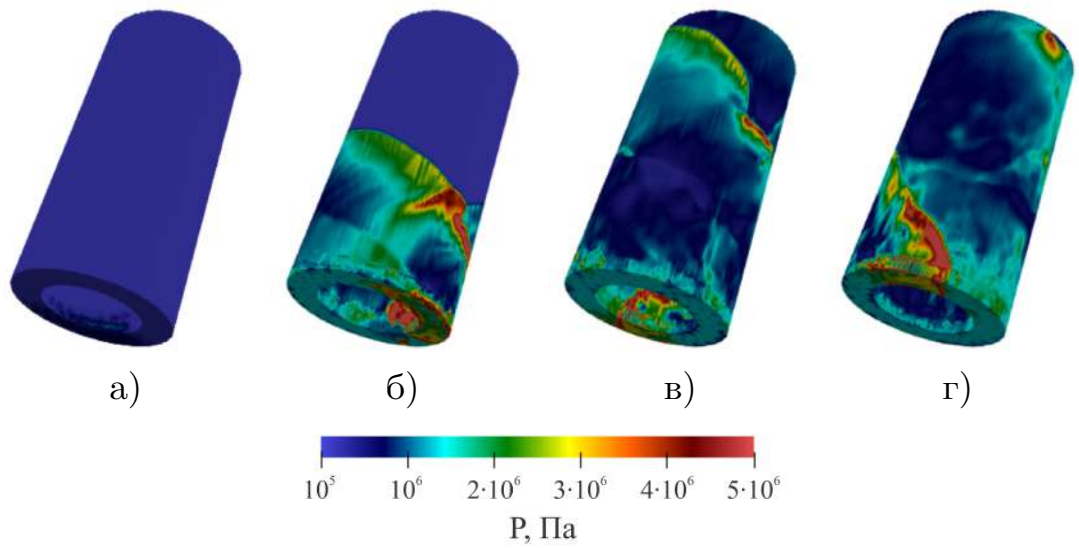


Рисунок 4.9 — Поля давления в различные моменты времени: (а) $t = 10$ мкс, (б) $t = 50$ мкс, (в) $t = 100$ мкс, (г) $t = 150$ мкс. Богатая смесь.

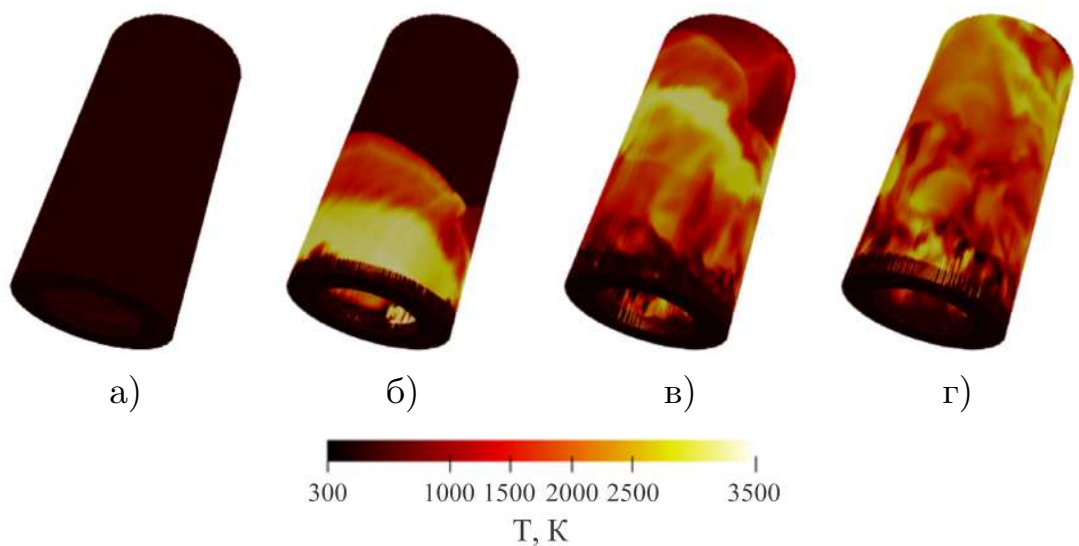


Рисунок 4.10 — Поля температуры в различные моменты времени: (а) $t = 10$ мкс, (б) $t = 50$ мкс, (в) $t = 100$ мкс, (г) $t = 150$ мкс. Богатая смесь.

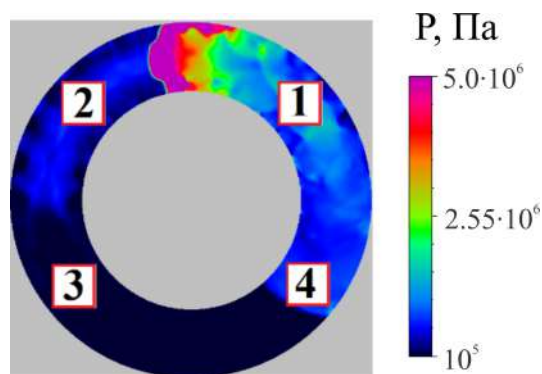


Рисунок 4.11 — Расположение виртуальных датчиков давления в сечении 5 мм от основной системы впрыска.

Следующая серия графиков показывает эволюцию во времени давления в выбранных четырех контрольных точках - виртуальных датчиках давления, расположенных в центрах выделенных квадратов в поперечном сечении на расстоянии 5 мм от основной системы впрыска (см. рисунок 4.11).

На Рис. 4.12 показано изменение давления во времени в виртуальных датчиках для бедной (а), стехиометрической (б) и богатой (в) смеси.

Регулярные пики давления на каждом датчике соответствуют моментам времени, когда детонационная волна проходит через датчик. Рисунок 4.12а показывает, что регулярную картину колебаний давления для бедной смеси. Первый пик на первом датчике всегда высокий (до 160 бар, как и первые) как и первые пики на других датчиках (которые, тем не менее, ниже). Послесильных всплесков пики давления уменьшаются, но не регулярно: некоторые пики ниже, чем следующие серии высоких пиков и т.д. На рисунке 4.12б показаны результаты для стехиометрической смеси. Первый пик во втором датчике - самый высокий (также около 160 бар), но затем величина пиков значительно уменьшается. Пики на втором круге вращения составляют не более 40 бар, затем их величина снова уменьшается до величины не превышающей 20 бар, а давление между пиками составляет около 12 бар. Приблизительно при $t = 270$ мкс давление в датчиках практически стабилизируется и остается постоянным. Это означает, что вращающаяся детонационная волна окончательно исчезла, и режим горения изменился со скачкообразной нерегулярной детонации на медленное горение.

Рисунок 4.12в для богатой смеси показывает картину, аналогичную рисунку 4.12а для бедной смеси, но временной интервал между пиками

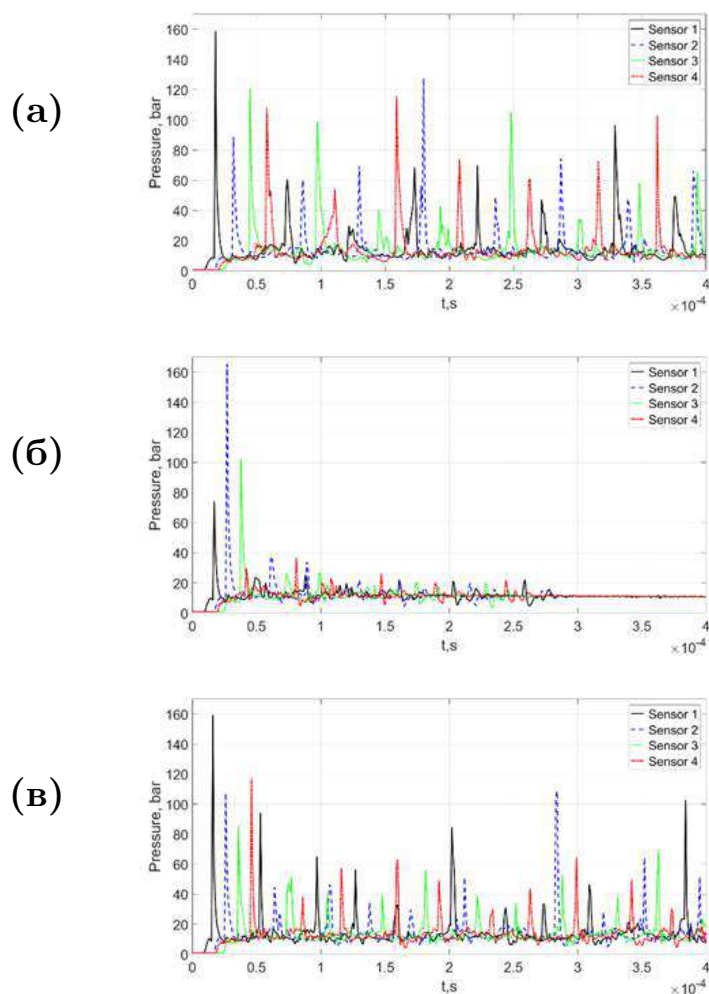


Рисунок 4.12 — Давление в зависимости от времени в виртуальных датчиках для бедной (а), стехиометрической (б) и богатой (в) смесей. Расположение датчиков показано на рисунке 4.11.

меньше. Это может быть объяснено более высокой скоростью звука в богатой водородно-кислородной смеси из-за большего количества легкого водородного компонента. Скорость детонационной волны пропорциональна скорости звука в исходной смеси, поэтому временной интервал между пиками меньше.

На рисунке 4.13 для сравнения представлено изменение давления только в первом датчике. Видно, что пики в богатой смеси сначала выше, но затем пики в бедной смеси становятся выше, чем для богатых, и далее поочередно, то выше для богатой, то для бедной.

В результате проведенных исследований трех типов газовой смеси установлен характер зависимости режима горения смеси от ее состава. Богатая и бедная смеси демонстрировали стабильное сохранение начального

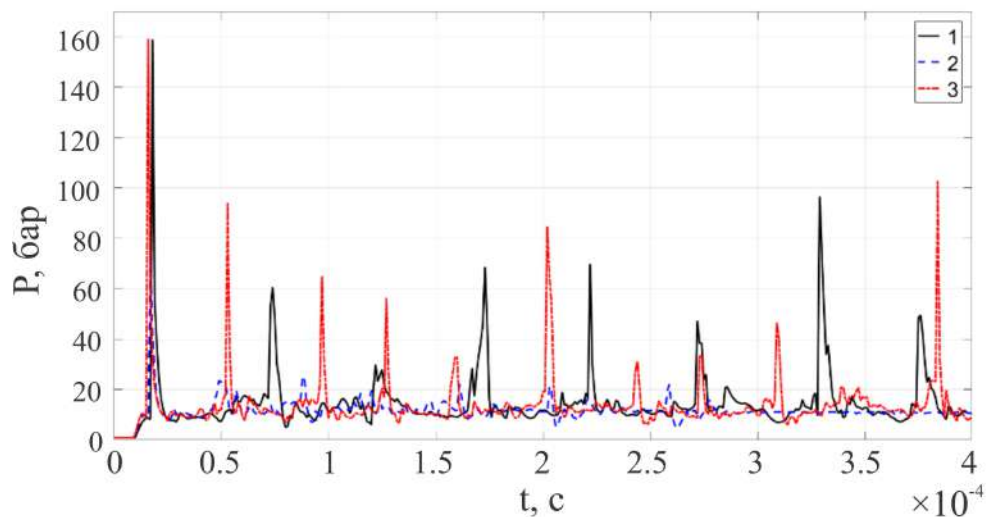


Рисунок 4.13 — Сравнение истории давления в первом датчике для трех видов смесей: бедных – 1, стехиометрических – 2 и богатых – 3.

режима вращающейся детонации до 400 мкс, тогда как стехиометрическая смесь показала принципиально иную картину: после первого цикла возникли вторичные волны, поглощавшие свежую смесь и гасившие первичную волну, что подтверждается данными массового расхода и давления, где временной интервал между волнами был как минимум вдвое меньше. Через 270 мкс стехиометрическая смесь полностью переходила в режим горения. С точки зрения эффективности, максимальный удельный импульс был зафиксирован для бедной смеси, несколько ниже – для богатой и значительно ниже – для стехиометрической, что напрямую связано с ее нестабильным режимом сгорания. Более низкая химическая чувствительность бедных и богатых смесей по сравнению со стехиометрической ограничивает вероятность вторичных воспламенений, что и обеспечивает устойчивое существование одиночной вращающейся детонационной волны.

Импульс выходного потока был максимальным для бедной смеси, немного ниже для богатой смеси и значительно ниже для стехиометрической смеси из-за режима сгорания последней. Химическая чувствительность бедной и богатой смеси ниже, чем стехиометрической. Поэтому вторичные воспламенения смеси небольшими ударными волнами происходят не так часто, что дает возможность установить режим вращения одной волны.

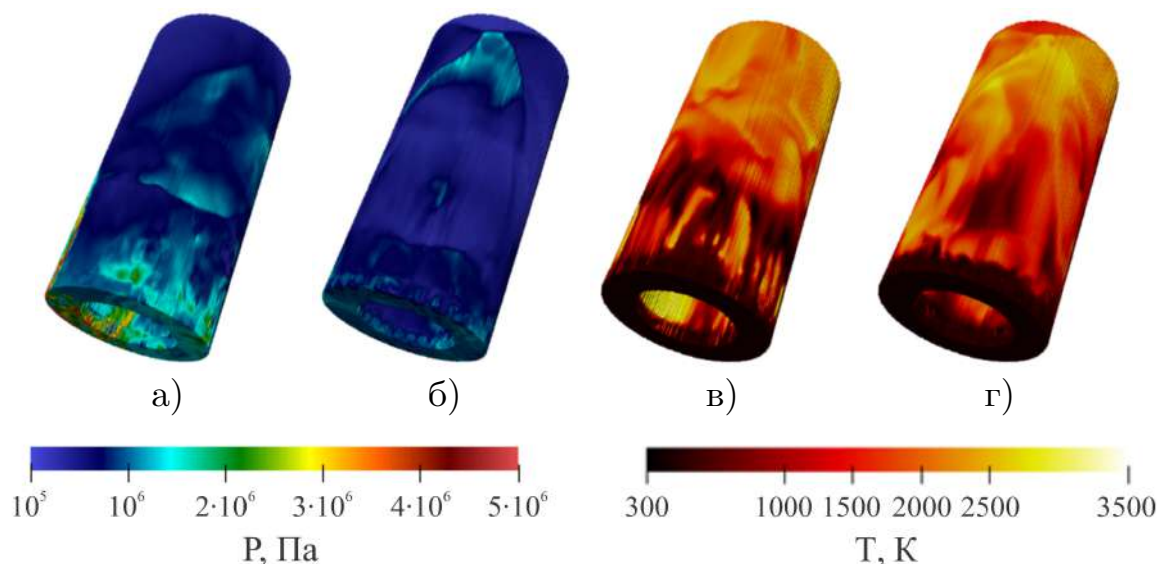


Рисунок 4.14 — Поле давления и температуры для бедной смеси: (а) давление в момент $t = 200$ мкс, (б) давление в момент $t = 400$ мкс; (в) температура в момент $t = 200$ мкс, (г) температура в момент $t = 400$ мкс.

4.5 Стабилизация детонационной волны. Непрерывный режим

Для стабилизации детонационной волны использовался метод подачи дополнительного кислорода из вспомогательной системы впрыска, расположенной на внешнем и внутреннем цилиндре (рисунок 4.1). Геометрические параметры канала соответствуют предыдущему случаю (раздел 4.4). В начальный момент времени в нем неподвижный воздух при давлении 1 бар и температуре 300 К. Из основной системы впрыска подавалась: богатая, стехиометрическая или бедная смесь водорода с кислородом. На рисунке 4.14 показаны трехмерные поля давления и температуры в моменты времени 200 и 400 мкс для бедной смеси $[\text{H}_2]:[\text{O}_2] = 1:1$, впрыскиваемой из основной системы, и дополнительной подачи кислорода из вспомогательной системы.

Для бедной смеси и для рассматриваемых параметров формируется детонационная волна, совершает 2 оборота и гаснет. Детонационное горение прекращается из-за недостатка топлива и избытка окислителя, поступающего из боковых отверстий.

На рисунке 4.15 показаны трехмерные поля давления и температуры в моменты времени 200 и 400 мкс для стехиометрической смеси $[\text{H}_2]:[\text{O}_2] =$

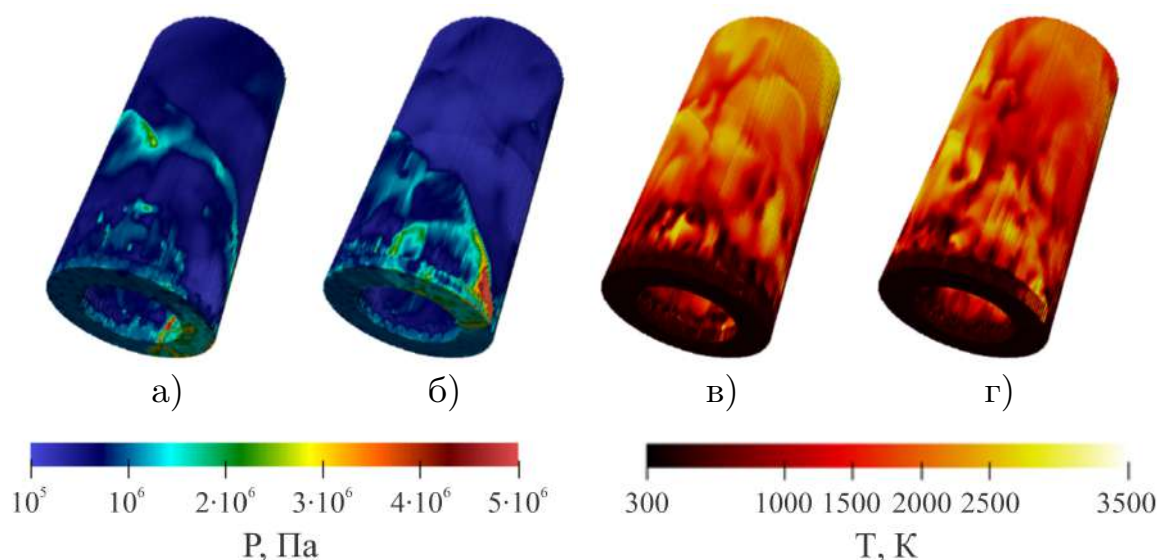


Рисунок 4.15 — Поле давления и температуры для стехиометрической смеси: (а) давление в момент $t = 200$ мкс, (б) давление в момент $t = 400$ мкс; (в) температура в момент $t = 200$ мкс, (г) температура в момент $t = 400$ мкс.

2:1, впрыскиваемой из основной системы, и дополнительного кислорода - из вспомогательной системы инжекторов.

Для стехиометрической смеси детонационная волна формируется и стабильно вращается до 600 мкс. После этого детонация переходит в горение. Реиницирование детонации не происходит.

На рисунке 4.16 показаны трехмерные поля давления и температуры в моменты времени 200 и 400 мкс для богатой смеси $[\text{H}_2]:[\text{O}_2] = 3:1$, впрыскиваемой из основной системы, и дополнительного кислорода из вспомогательных.

Для богатой смеси наблюдается устойчивая детонационная волна с периодически возникающими взрывами то перед ней, то за ней. Продукты этих взрывов уносятся дополнительным кислородом из вспомогательной системы. Сравнительный анализ показывает, что поперечная подача окислителя через боковые форсунки повышает устойчивость процесса по сравнению с подачей предварительно перемешанной смеси из трех систем впрыска, рассмотренной в разделе 4.4. В частности, при работе на стехиометрической смеси, которая проявляла большую склонность к неустойчивости, был зафиксирован стабильный режим распространения детонационной волны.

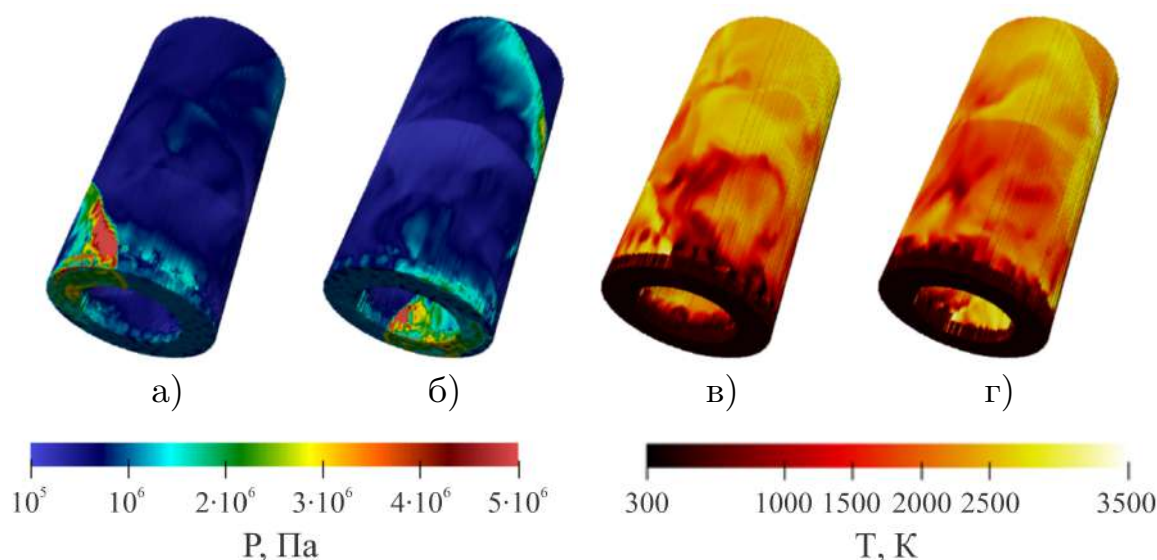


Рисунок 4.16 — Поле давления и температуры для богатой смеси: (а) давление в момент $t = 200$ мкс, (б) давление в момент $t = 400$ мкс; (в) температура в момент $t = 200$ мкс, (г) температура в момент $t = 400$ мкс.

4.6 Влияние состава смеси на характеристики горения в канале длиной 20 см

Далее представлены результаты исследования детонации в трех смесях: бедная смесь (молярное отношение $[\text{H}_2]: [\text{O}_2] = 1: 1$), стехиометрическая смесь ($[\text{H}_2]: [\text{O}_2] = 2: 1$), и богатая смесь ($[\text{H}_2]: [\text{O}_2] = 3: 1$), которые подавались через основную систему впрыска с давлением торможения 15 бар и температурой 258 К, а дополнительный 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: $N_{r1} = 56$ на внутренней стенке и $r_2 = 68$ на внешней; радиус каждой из них составлял $r = 0.15$ см (рисунок 4.1).

Для получения информации о детонации в области с измененной геометрией рассматривались девять вариантов при условии подачи горючей смеси из основной системы впрыска: 1) бедная смесь, 2) стехиометрическая

смесь, 3) богатая смесь, 4) бедная смесь и кислород из вспомогательной системы, 5) бедная смесь и воздух из вспомогательной системы, 6) стехиометрическая смесь и кислород из вспомогательной системы, 7) стехиометрическая смесь и воздух из вспомогательной системы, 8) богатая смесь и кислород из вспомогательной системы, 9) богатая смесь и воздух из вспомогательной системы.

4.6.1 Бедная смесь

Было установлено, что средние значения параметров не претерпевают значительных изменений при расширении базы осреднения [300, 700] мкс до [300, 1000] мкс. Это указывает на относительную стабильность процесса. На рисунке 4.17 показано поле давления для вариантов 4) и 5) На рисунке 4.17(в, г, ж, з, л, м) представлено сечение Oxz на расстоянии 5 мм от торца (рисунок 4.1а). Без подачи из вспомогательной системы в момент времени 100 мкс (рисунок 4.17(а, в)) появляются новые волны детонации. Аналогичная картина имеет место и с подачей из вспомогательной форсуночной системы. В момент времени 400 мкс (рисунок 4.17(б, г)) имеется несколько волн и происходит значительное падение давления, если нет дополнительной подачи воздуха или кислорода, а при дополнительной подаче кислорода в этот момент есть единственная детонационная волна (рисунок 4.17(е, з)). При дополнительной подаче воздуха наблюдается многоголовый режим детонации (рисунок 4.17(к, м)).

На рисунке 4.18 показано поле температуры для вариантов 1), 4) и 5) при подаче бедной смеси с дополнительной подачей кислорода или воздуха из вспомогательной системы на боковых стенках, а также без нее. Здесь, как и на предыдущем рисунке 4.17, представлены поля давления в канале (рисунок 4.18(а, б, д, е, и, к)), и в сечении Oxz на расстоянии 5 мм от торца канала (рисунок 4.18(в, г, ж, з, л, м) в моменты времени 100 и 400 мкс. Детонационные волны можно определить по областям с высокой температурой, а зоны свежей смеси - по областям с низкой температурой.

На рисунке 4.19 представлена зависимость реактивной силы от времени для вариантов с бедной смесью.

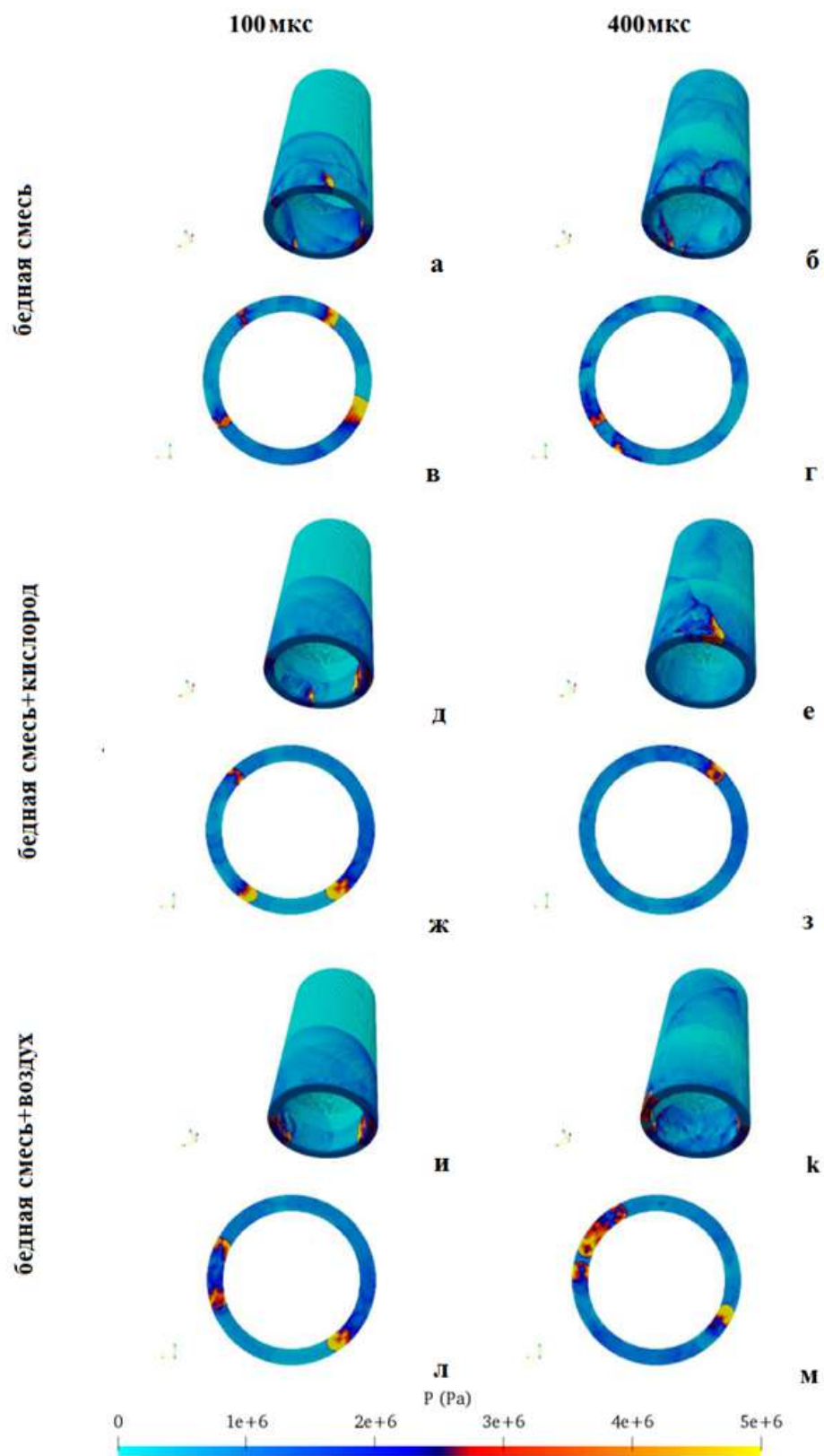


Рисунок 4.17 — Поле давления для вариантов с бедной смесью.

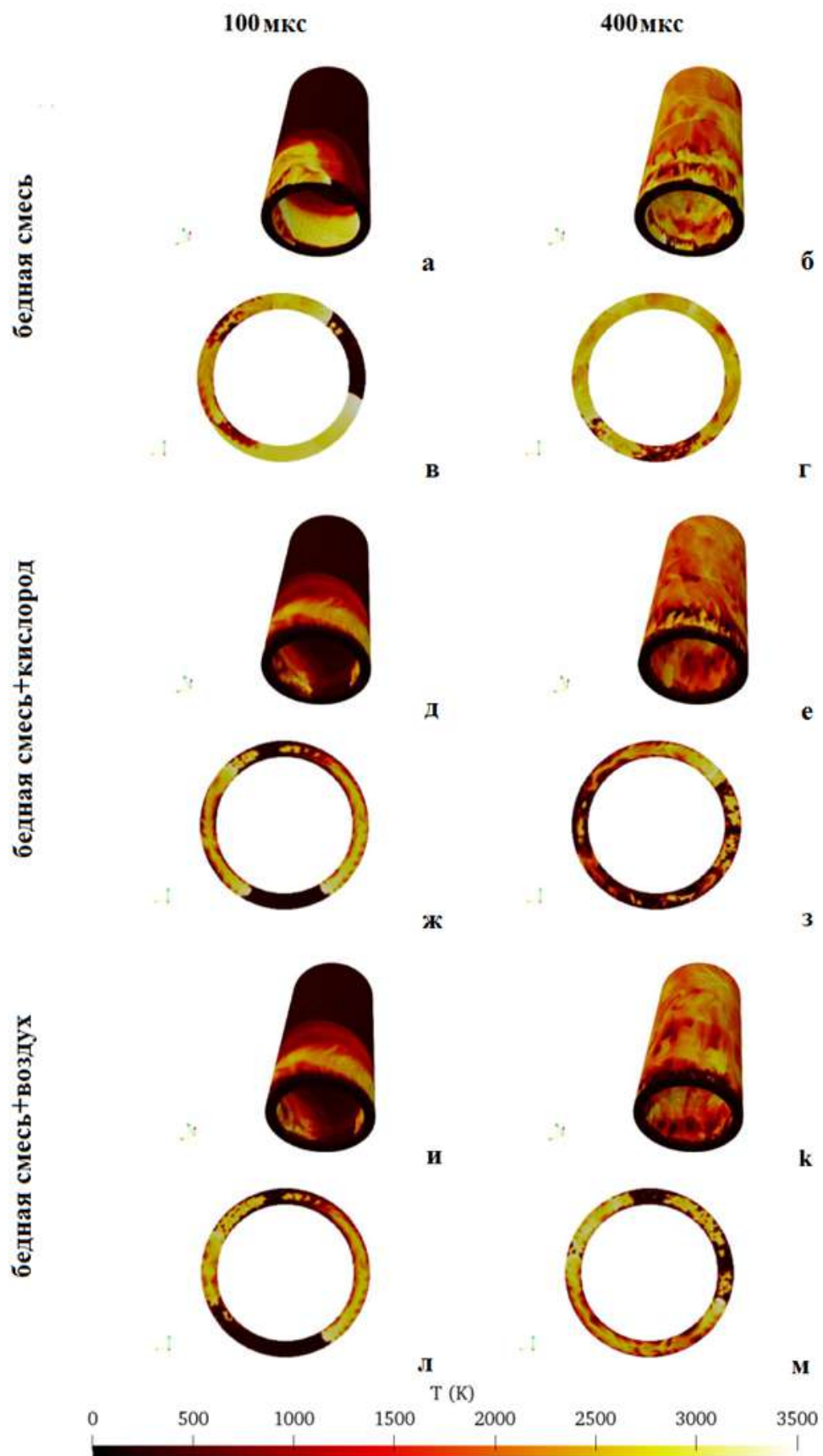


Рисунок 4.18 — Поле температуры для вариантов с бедной смесью.

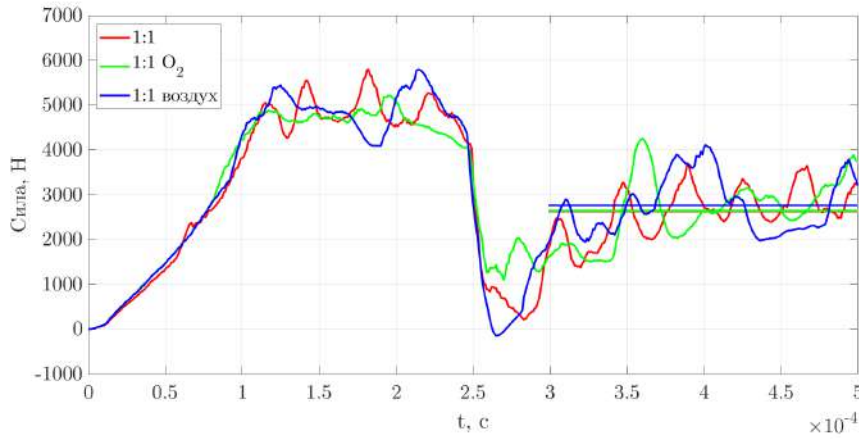


Рисунок 4.19 — Реактивная сила для случаев бедной смеси. Красная кривая - бедная смесь, зеленая кривая - бедная смесь с дополнительной подачей кислорода, синяя кривая - бедная смесь с дополнительной подачей воздуха.

Реактивная сила вычислялась как интеграл по все непроницаемой границе области течения от произведения давления на проекцию на ось симметрии вектора внешней нормали:

$$P = \iint_{\Omega_{wall}} \left(\tilde{p} + \frac{2}{3} \rho K \right) n d\sigma \quad (4.19)$$

Удельный импульс вычисляется следующим образом: сила в Ньютонах переводится в килограмм-силы делением на $g = 9.8$, затем полученная величина делится на расход горючего в кг/с:

$$I_{g,x} = \frac{P_x}{g f_{mfuel}} \quad (4.20)$$

Для бедной смеси без дополнительной подачи средняя реактивная сила составляет 2632 Н, с дополнительным кислородом - 2643 Н, с дополнительным воздухом - 2766 Н. Таким образом максимальное среднее значение реактивной силы было получено при подаче бедной смеси с дополнительным воздухом и составляет 2766 Н.

На рисунке 4.20 представлен удельный импульс смеси как функция времени для всех трех случаев использования бедной смеси. Без дополнительной подачи средний удельный импульс составляет 2163 с, с дополнительной подачей кислорода - 2891 с, а с дополнительной подачей воздуха - 3093 с. Таким образом максимальное значение среднего удельного

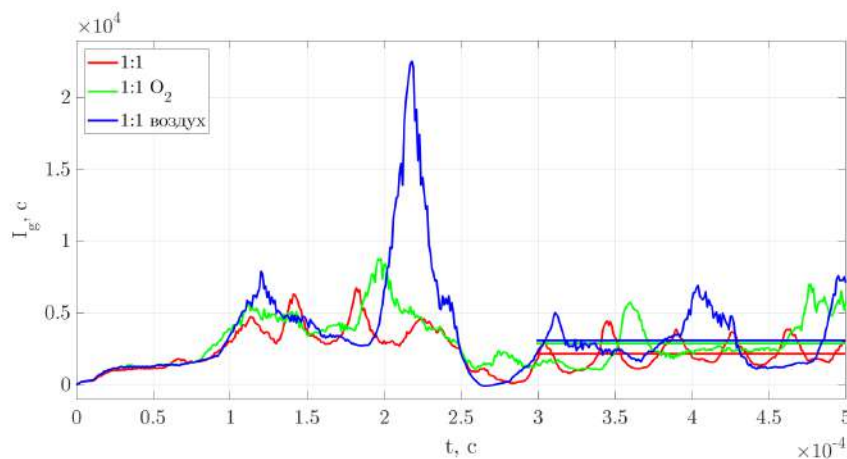


Рисунок 4.20 — Удельный импульс для бедной смеси. Красная кривая - бедная смесь, зеленая кривая - бедная смесь с дополнительной подачей кислорода, синяя кривая - бедная смесь с дополнительной подачей воздуха.

импульса получено для варианта 5) - подача бедной смеси с дополнительным воздухом и составляет 3093 с.

4.6.2 Стехиометрическая смесь

На рисунке 4.21 показано поле давления для вариантов 2), 6) и 7). Для варианта 2) через 100 мкс (рисунок 4.21(а,в)) формируется одна волна детонации. Эта волна затухает к моменту времени 400 мкс (рисунок 4.21(б,г)). Постепенно эти колебания приводят к почти полному сгоранию топлива к моменту времени 400 мкс (рисунок 4.21(б, г)). При дополнительной подаче кислорода происходит снижение давления, но конфигурация волны хорошо различима при 400 мкс (рисунок 4.21(е,з)).

На рисунке 4.22 показано поле температуры для стехиометрической смеси. При отсутствии дополнительной подачи через 400 мкс появляются локальные очаги горения (рисунок 4.22(б, г)). На этом рисунке по высокой температуре можно определить наличие волн, а по низкой - порции свежей смеси.

На рисунке 4.23 представлена реактивная сила для стехиометрической смеси в зависимости от времени. Средняя сила составляет 2668 Н. При дополнительной подаче кислорода она равна 2697 Н, а воздуха - 2738 Н. Таким

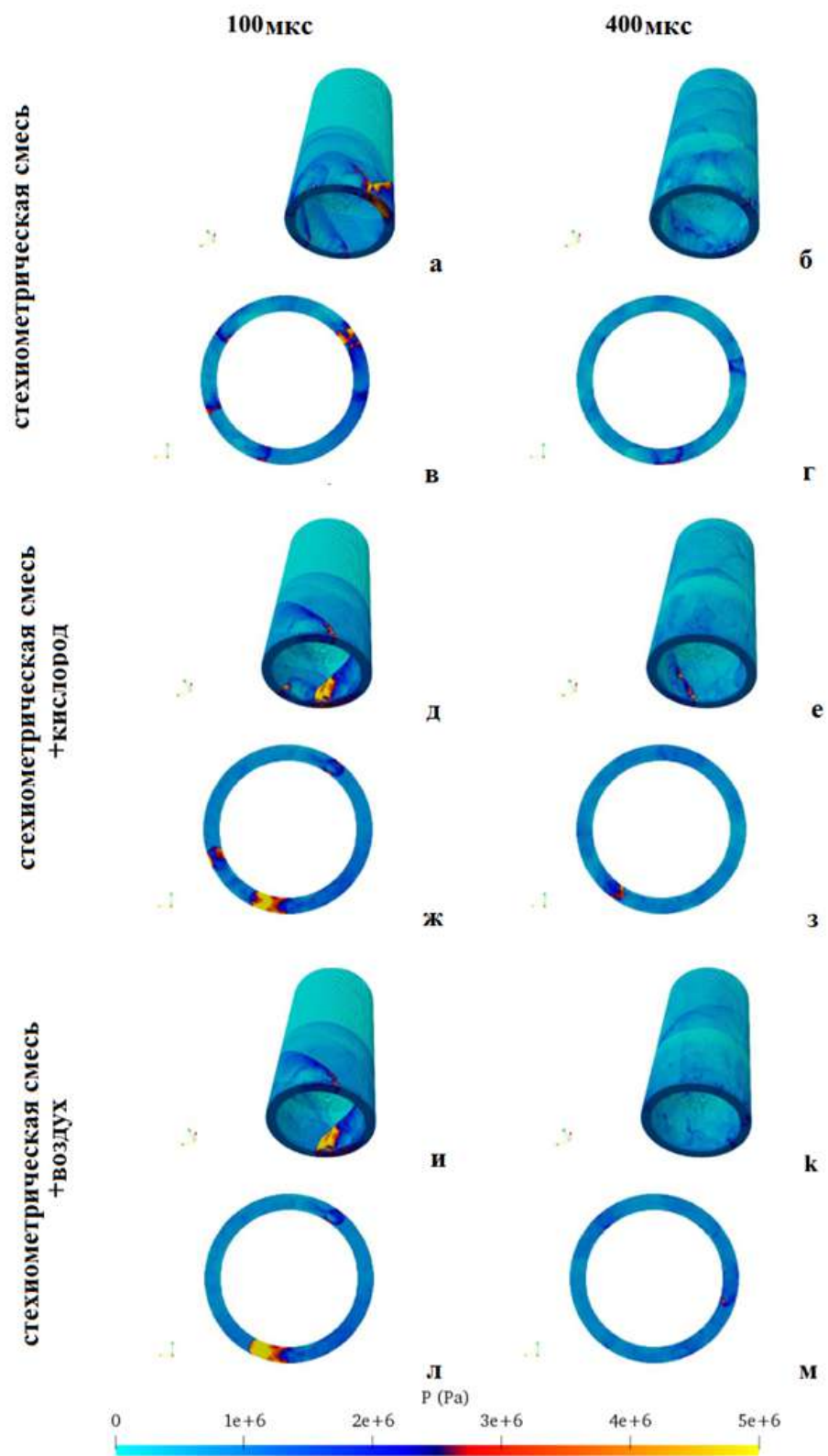


Рисунок 4.21 — Поле давления для стехиометрической смеси.

образом максимальное среднее значение получено для стехиометрической смеси с добавлением воздуха и составляет 2738 Н.

На рисунке 4.24 представлена зависимость от времени удельного импульса для трех рассмотренных вариантов. Без дополнительной подачи средний удельный импульс составляет 1495 с, При дополнительной подаче кислорода он равен 2054 с, а воздуха - 2054 с. Таким образом максимальное среднее значение удельного импульса было получено для стехиометрической смеси с дополнительной подачей воздуха или кислорода и составило 2054 с.

4.6.3 Богатая смесь

На рисунке 4.25 показано поле давления при подаче богатой смеси или богатой смеси с дополнительной подачей кислорода или воздуха. Без дополнительной подачи через 400 мкс (рисунок 4.25(б,г)) детонация восстанавливается. С дополнительной подачей кислорода в момент времени 100 мкс формируются две волны детонации (рисунок 4.25(д,ж)). В момент времени 400 мкс реализуется многоволновой режим (рис. 4.25(е,з)). При дополнительной подаче воздуха (рисунок 4.25(к, м)) реализуется двухволновой режим.

На рисунке 4.26 показано поле температуры для богатой смеси и богатой смеси с дополнительной подачей кислорода или воздуха. Без дополнительной подачи через 400 мкс появляется множество очагов горения (рисунок 4.25(б, г)). Во всех случаях можно идентифицировать детонационные волны по высокой температуре.

На рисунке 4.27 представлена зависимость реактивной силы от времени для богатой смеси и для богатой смеси с дополнительной подачей кислорода или воздуха. Без дополнительной подачи средняя сила составляет 2970 Н, при дополнительной подаче кислорода - 3173 Н, а воздуха - 3082 Н. Таким образом среднее максимальное значение реактивной силы получено для богатой смеси с добавлением кислорода и составляет 3173 Н.

На рисунке 4.28 представлена зависимость удельного импульса от времени случаев богатой смеси и богатой смеси с дополнительной подачей

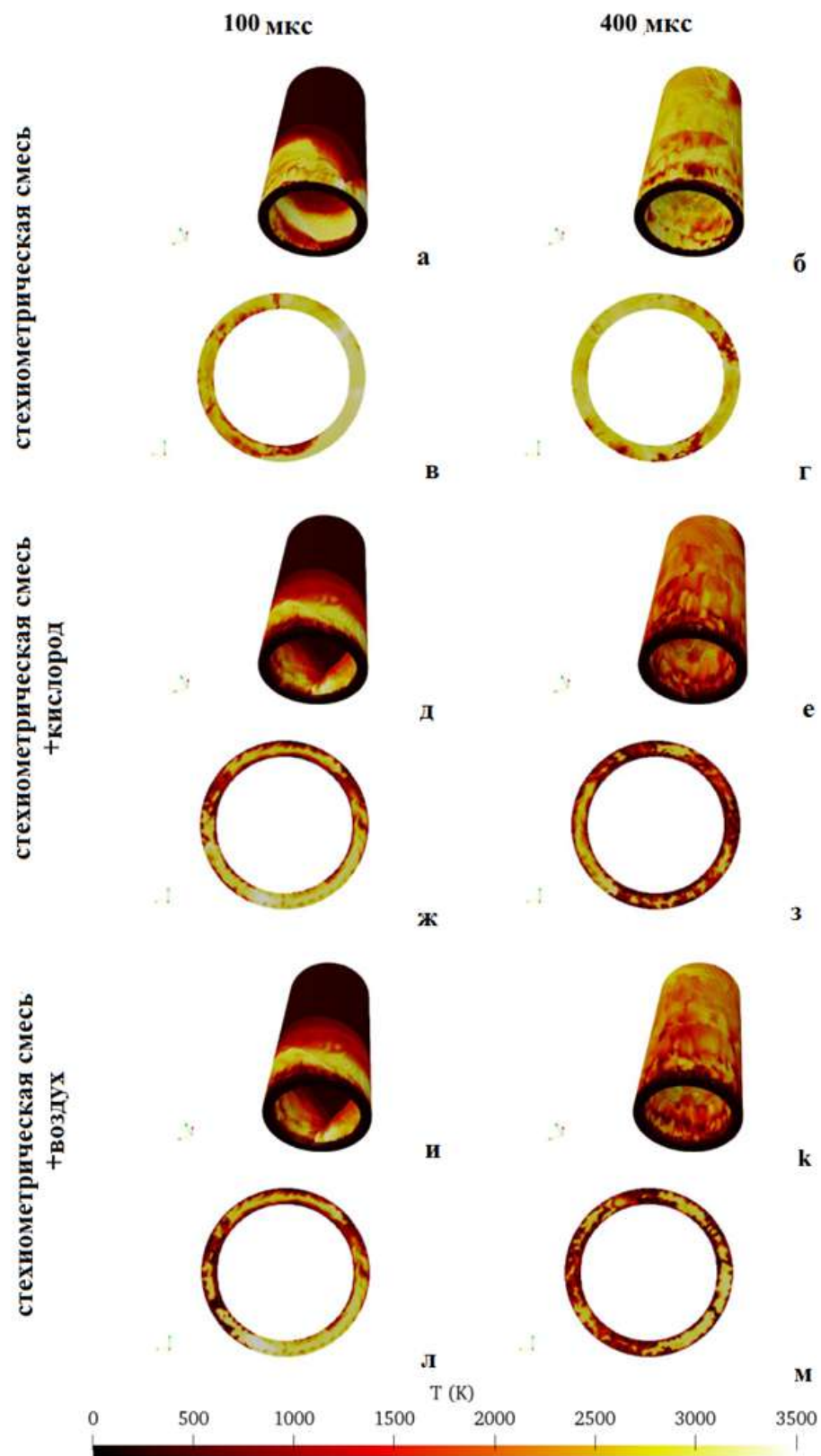


Рисунок 4.22 — Поле температуры для стехиометрической смеси.

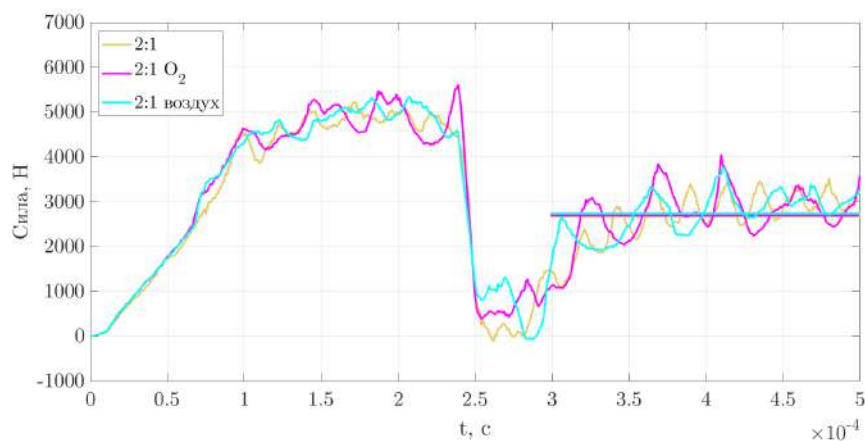


Рисунок 4.23 — Реактивная сила для стехиометрической смеси.

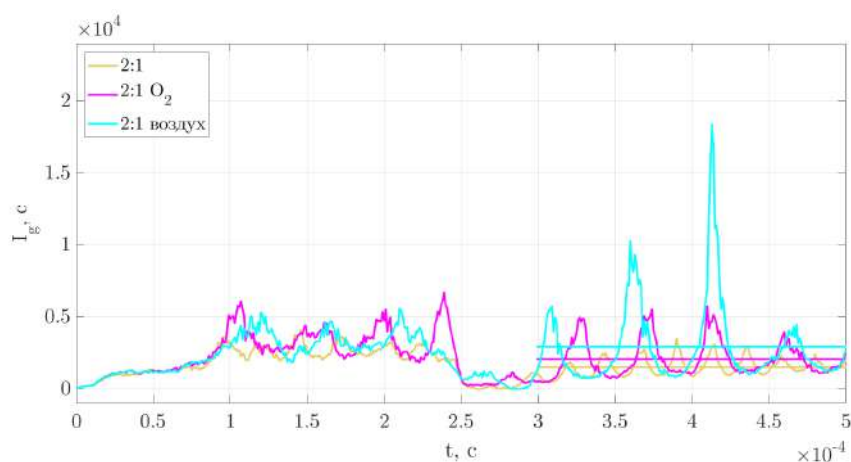


Рисунок 4.24 — Удельный импульс для стехиометрической смеси.

кислорода или воздуха. Без дополнительной подачи средний удельный импульс составляет 1231 с, при подаче дополнительного кислорода - 1745 с, а воздуха - 1517 с. Таким образом максимальное среднее значение удельного импульса получено для богатой смеси с добавлением кислорода и составляет 1745 с.

Таблица 3 — Средний расход водорода, кг/с.

	Бедная смесь	Стехиометрическая смесь	Богатая смесь
Без добавления	0.13	0.20	0.26
С добавлением кислорода	0.11	0.17	0.21
С добавлением воздуха	0.11	0.15	0.21

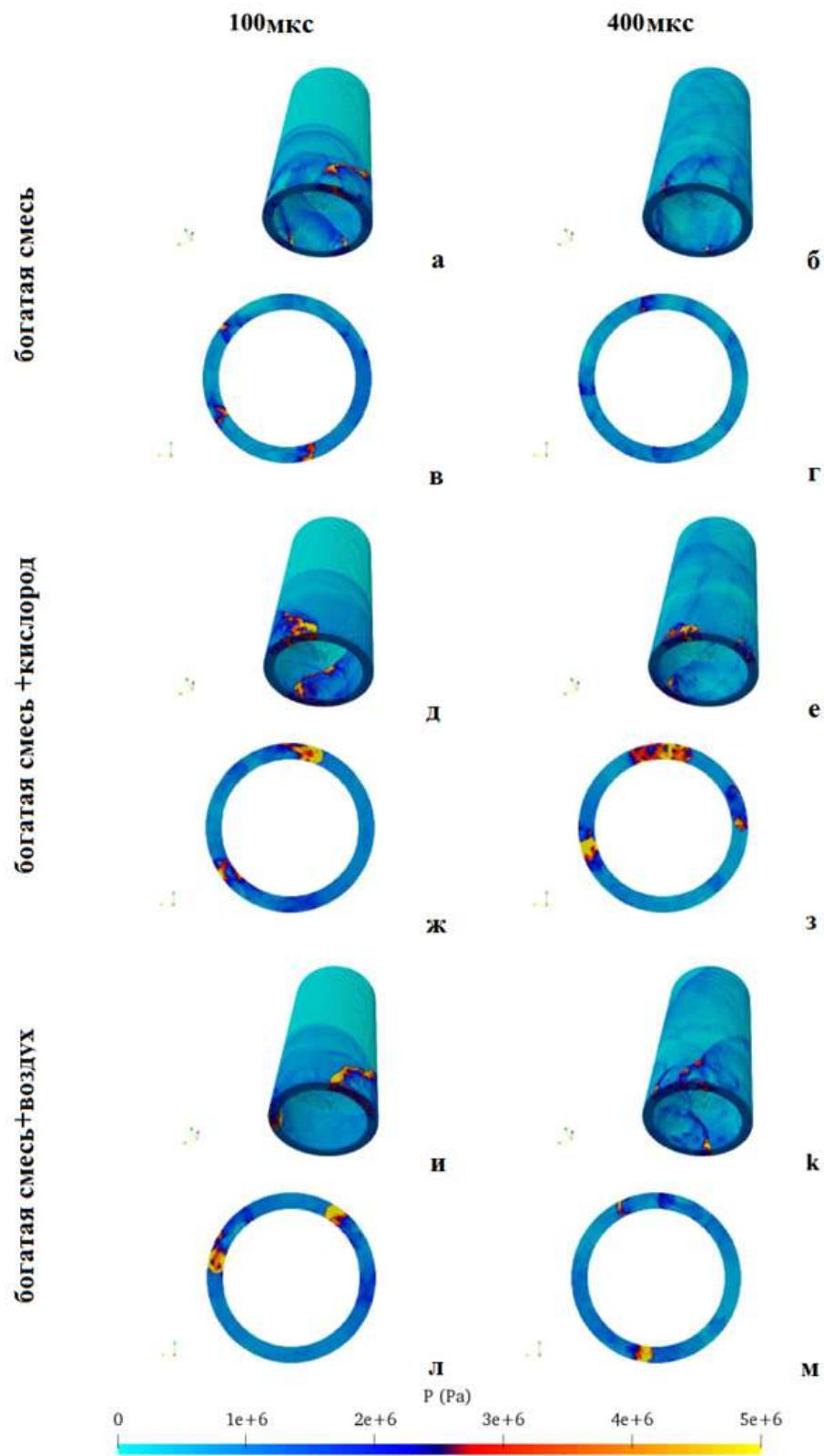


Рисунок 4.25 — Поле давления для богатой смеси.

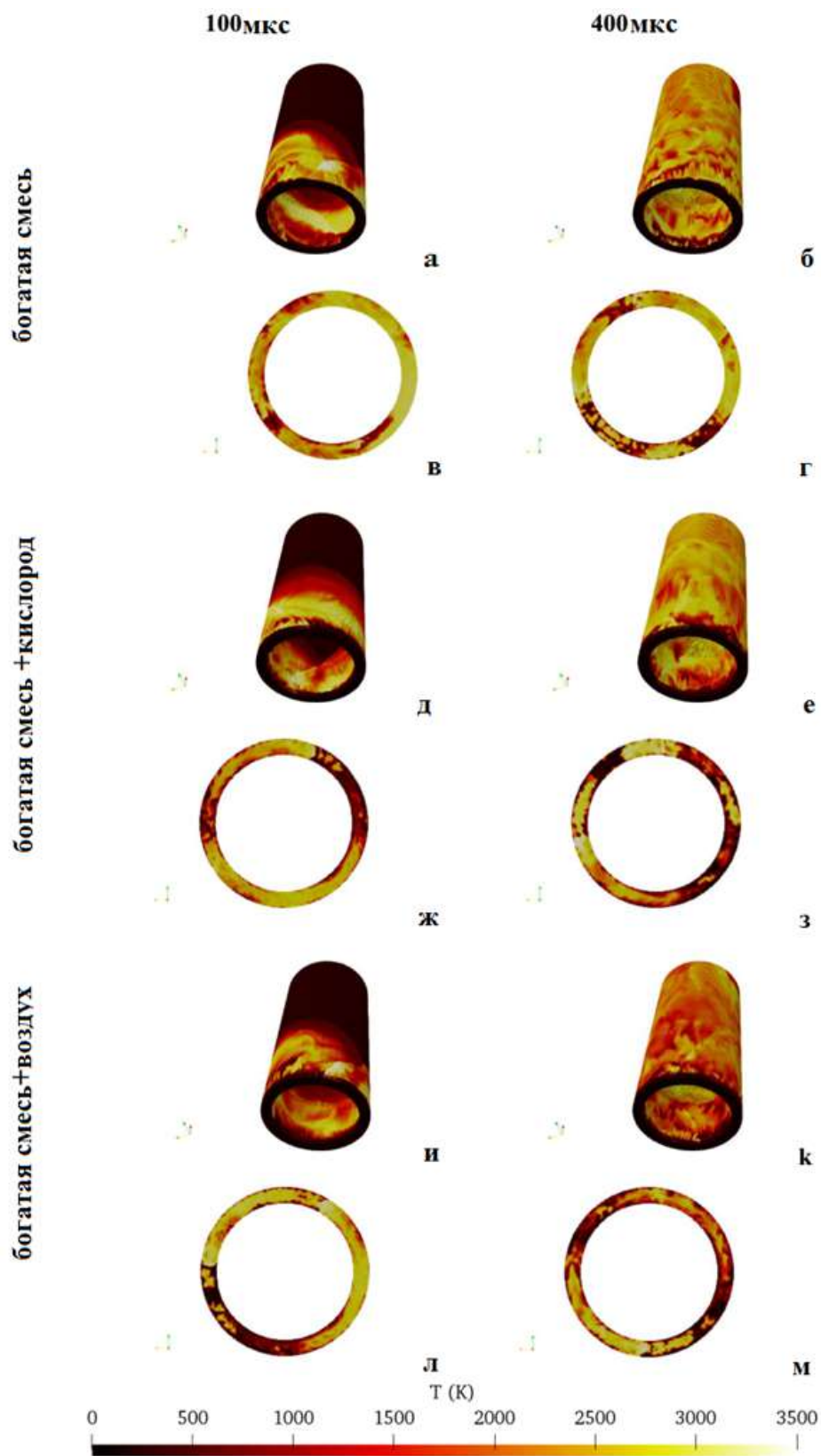


Рисунок 4.26 — Поле температуры для богатой смеси.

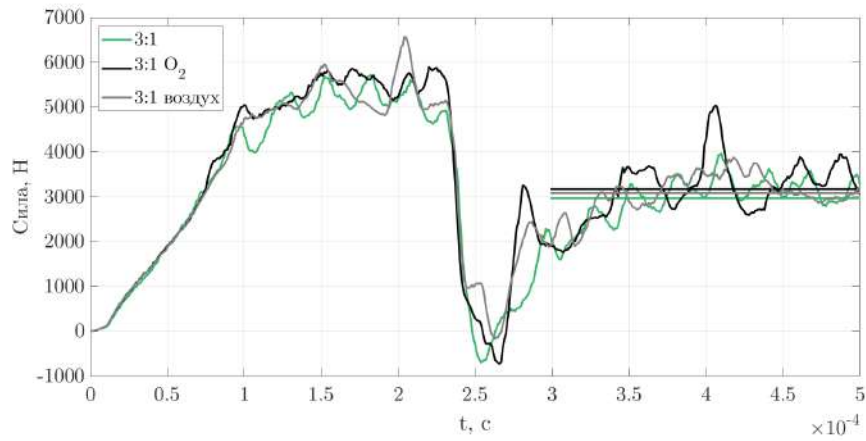


Рисунок 4.27 — Реактивная сила для богатой смеси.

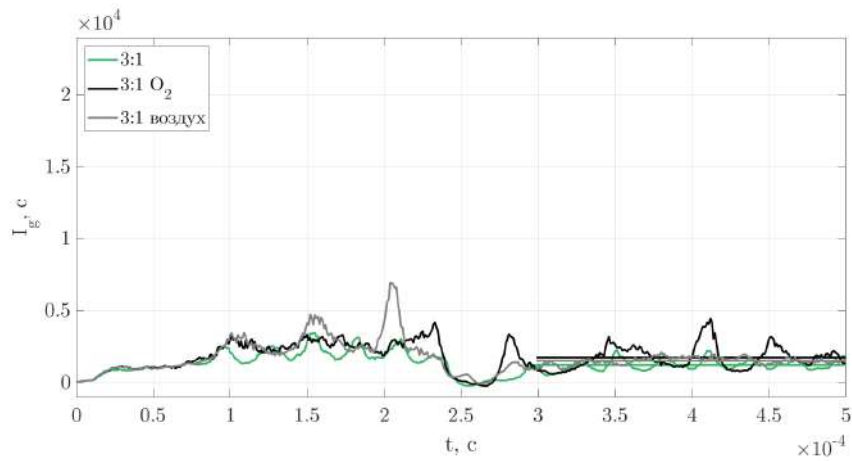


Рисунок 4.28 — Удельный импульс для богатой смеси.

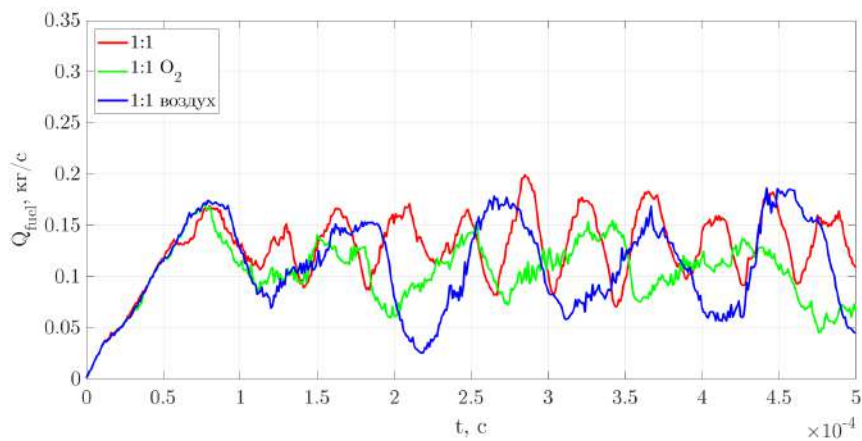


Рисунок 4.29 — Расход водорода для вариантов с бедной смесью.

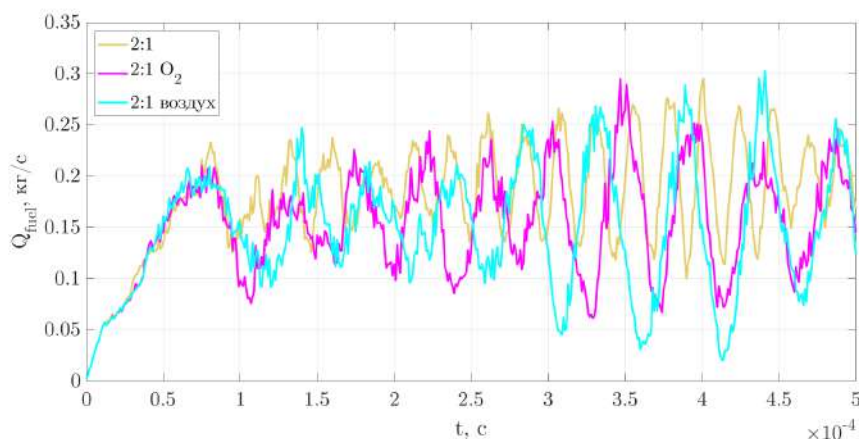


Рисунок 4.30 — Расход водорода для вариантов со стехиометрической смесью.

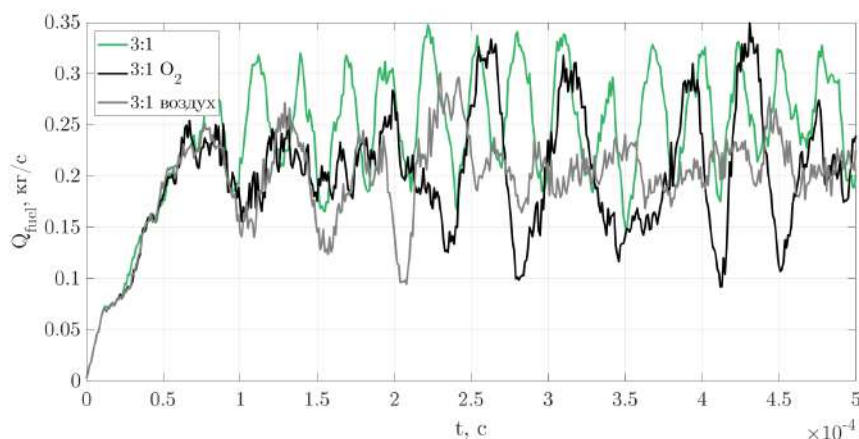


Рисунок 4.31 — Расход водорода для вариантов с богатой смесью.

На рисунках 4.29 - 4.31 показан расход водорода для всех 9 рассмотренных случаев. На рисунках 4.32 - 4.34 показан поток окислителя для рассмотренных случаев.

Максимальный средний расход водорода получен для богатой смеси без дополнительной подачи, а минимальный - бедной смеси с дополнительной подачей воздуха или кислорода. Максимальный средний расход окислителя получен для бедной смеси без дополнительной подачи, а минимальный - для богатой смеси с дополнительной подачей воздуха.

Поле коэффициента избытка горючего в плоскости Oxy при $t = 400$ мкс показано на рисунке 4.35. Его наибольшая величина получается для богатой смеси без дополнительной подачи, а наименьшая - для бедной смеси.

На рисунке 4.36 показано поле массовой доли горючего в момент $t = 400$ мкс, которое позволяет определить положение детонационной волны и области с несгоревшим горючим. Так, на рисунке 4.36(в, и)) хорошо видно,

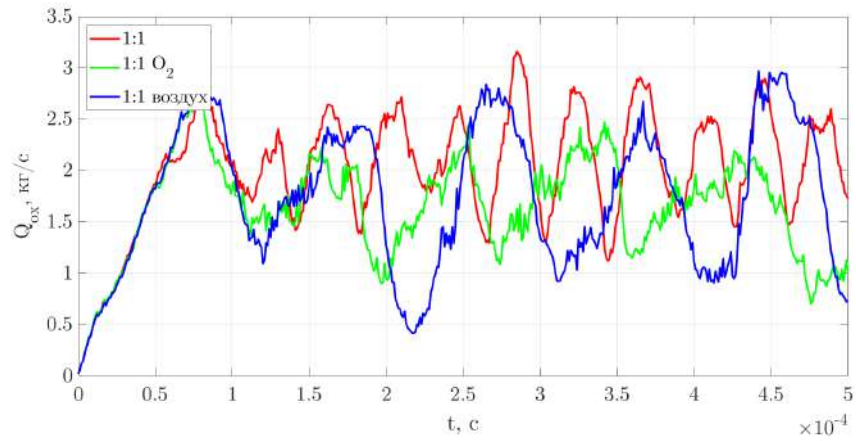


Рисунок 4.32 — Расход водорода для вариантов с богатой смесью.

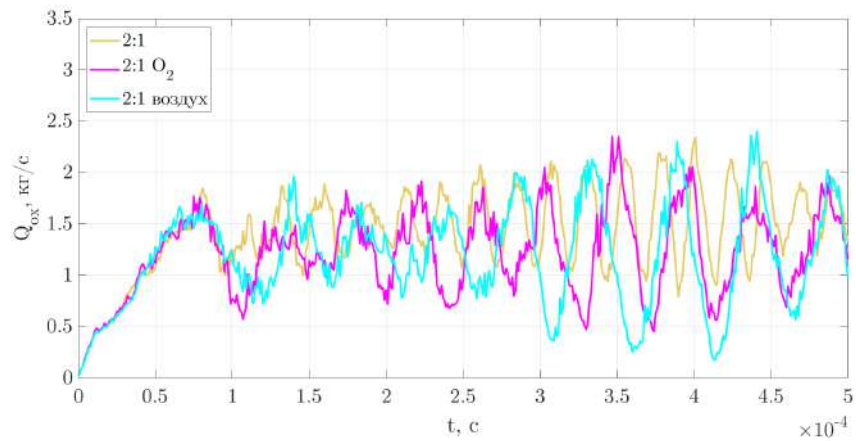


Рисунок 4.33 — Расход кислорода для вариантов со стехиометрической смесью.

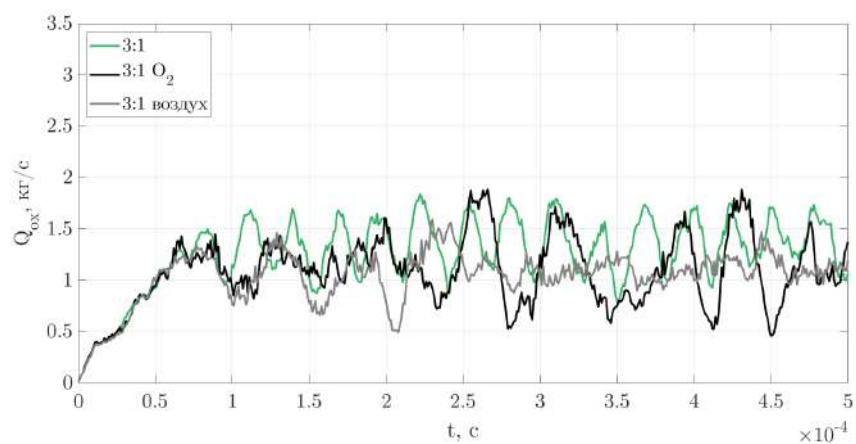


Рисунок 4.34 — Расход кислорода для богатой смеси.

Таблица 4 — Средний поток окислителя, кг/с.

	Бедная смесь	Стехиометрическая смесь	Богатая смесь
Без добавления	2.14	1.58	1.37
С добавлением кислорода	1.67	1.31	1.12
С добавлением воздуха	1.74	1.19	1.11

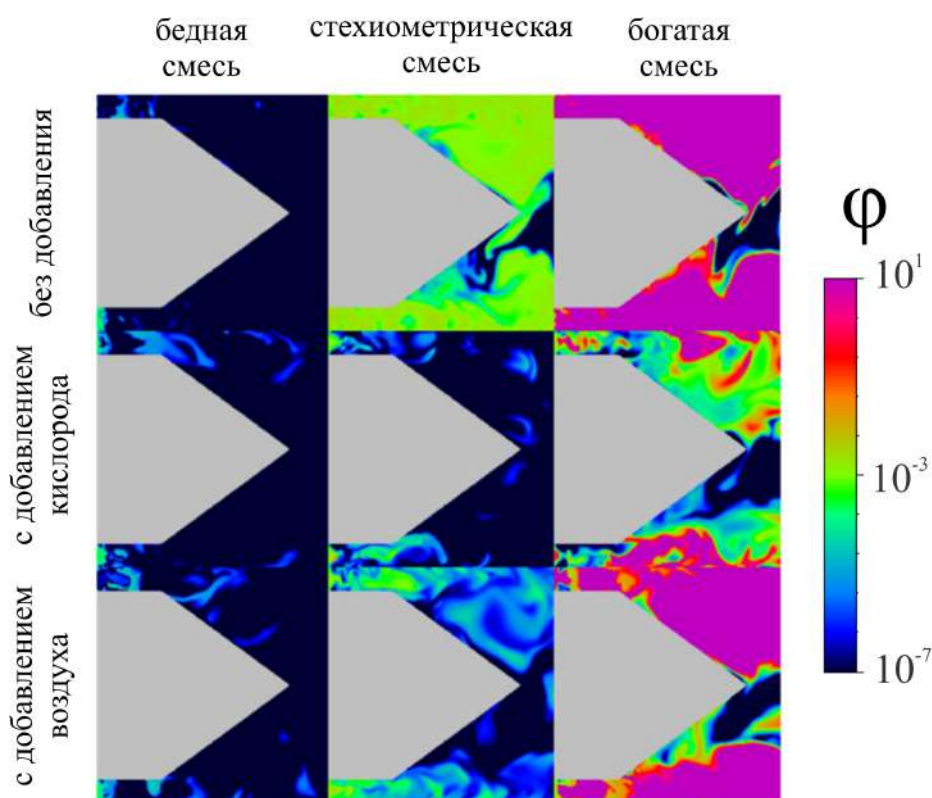
Рисунок 4.35 — Коэффициент избытка горючего в плоскости Oxy для всех рассмотренных случаев при $t = 400$ мкс.

Таблица 5 — Средняя величина коэффициента избытка горючего для рассмотренных случаев.

	Бедная смесь	Стехиометрическая смесь	Богатая смесь
Без добавления	0.486	1.013	1.518
С добавлением кислорода	0.527	1.038	1.500
С добавлением воздуха	0.506	1.008	1.514

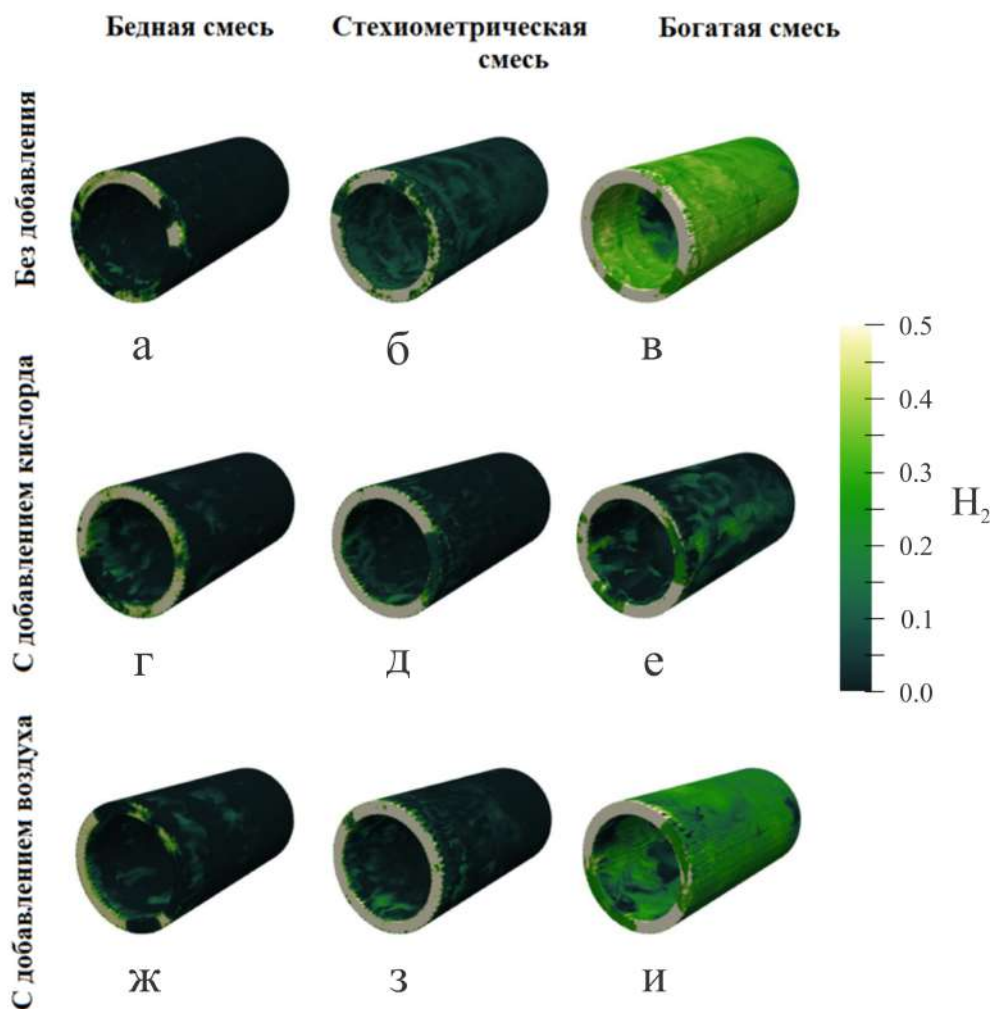


Рисунок 4.36 — Трехмерное поле массовой доли горючего для всех рассмотренных случаев в момент $t = 400$ мкс.

что значительное количество несгоревшей смеси остается в случаях богатой смеси и богатой смеси с дополнительной подачей воздуха.

Таким образом установлено, что для богатой смеси образуется дефицит окислителя (рисунок 4.37(в, и)). Для всех вариантов с обедненной смесью и для вариантов с стехиометрической смесью при дополнительной подаче кислорода наблюдается хорошее догорание остатков горючего (рисунок 4.36(а, г, д, ж)).

В девяти рассмотренных случаях регистрировалось мгновенное статическое давление в трех точках (виртуальные датчики) внутри канала. Расположение этих датчиков на расстоянии 5 мм от торца показано на рисунке 4.38.

На рисунке 4.39 показано изменение со временем давления на виртуальных датчиках для бедной смеси. Максимальное давление зарегистри-

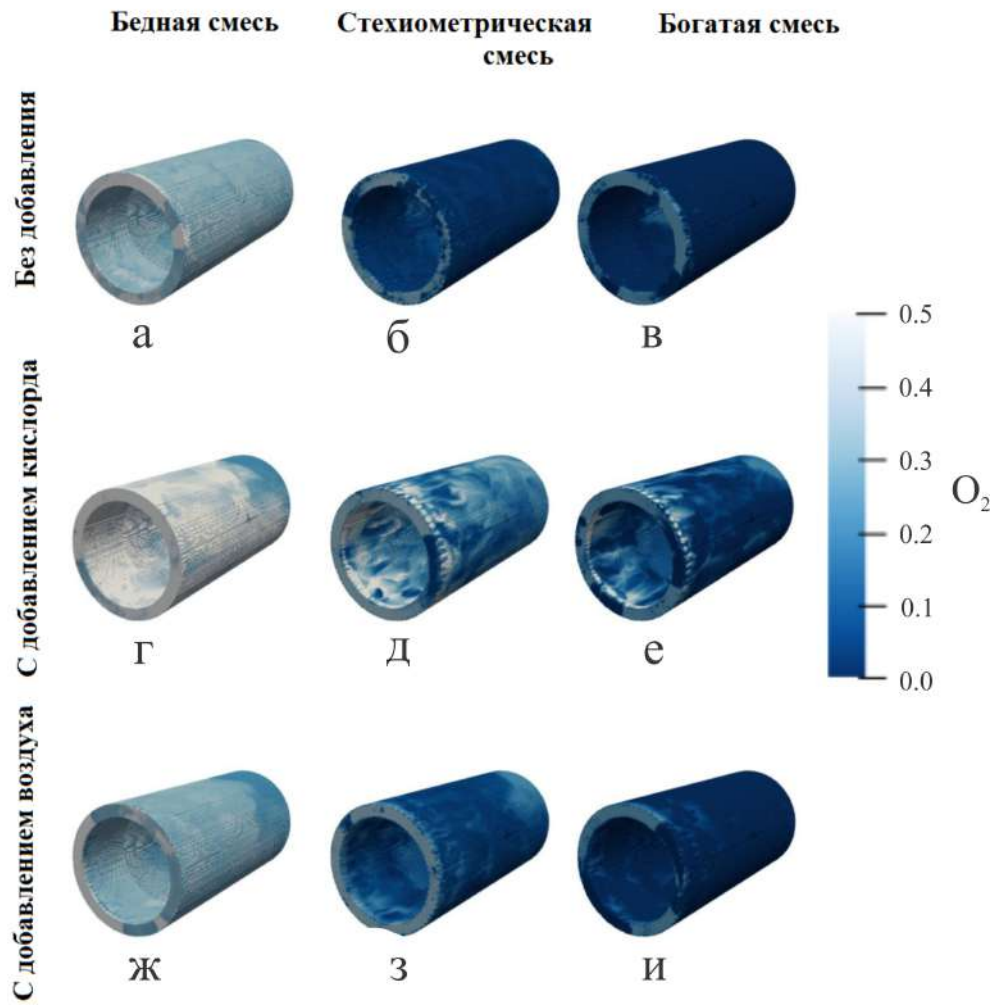


Рисунок 4.37 — Трехмерное поле массовой доли окислителя для всех рассмотренных случаев в момент $t = 400$ мкс.

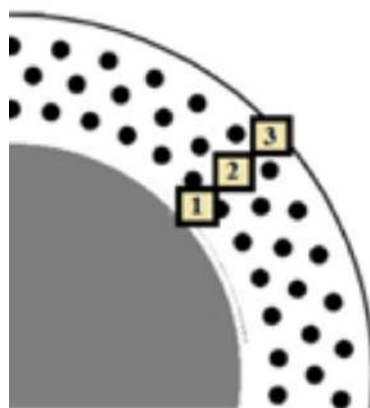


Рисунок 4.38 — Размещение “виртуальных датчиков”.

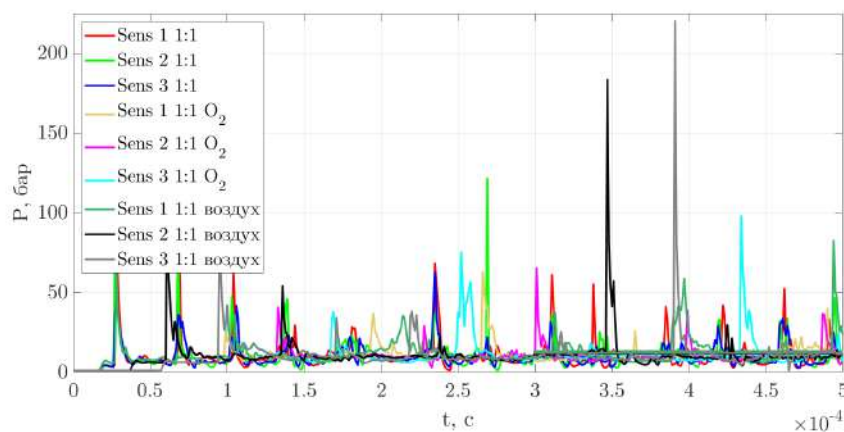


Рисунок 4.39 — Давление на “виртуальных датчиках” для бедной смеси.

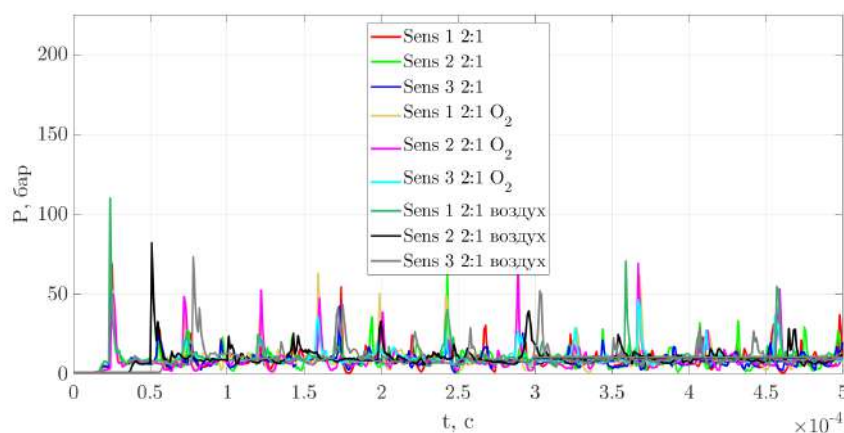


Рисунок 4.40 — Давление на “виртуальных датчиках” для стехиометрической смеси.

ровано датчиком с номером 1, и составляет 10.61 бар в варианте без дополнительной подачи. Минимальное давление, равное 8 бар, зарегистрировано центральным датчиком для бедной смеси с подачей воздуха.

На рисунке 4.40 показано изменение со временем давления на виртуальных датчиках для стехиометрической смеси. Максимальное давление зарегистрировано на датчике 3, расположенном у торца, и составляет 11.18 бар для варианта с дополнительной подачей воздуха. Минимальное давление, равное 9.47 бар, зарегистрировано на центральном датчике 2 для варианта с дополнительной подачей кислорода.

На рисунке 4.41 показано изменение со временем мгновенного давления на виртуальных датчиках для богатой смеси. Максимальное давление зарегистрировано на датчике 1, и составляет 13.16 бар для варианта без дополнительной подачи. Минимальное давление, равное 9.82 бар, зарегистрировано на датчике 3 для варианта дополнительной подачи кислорода.

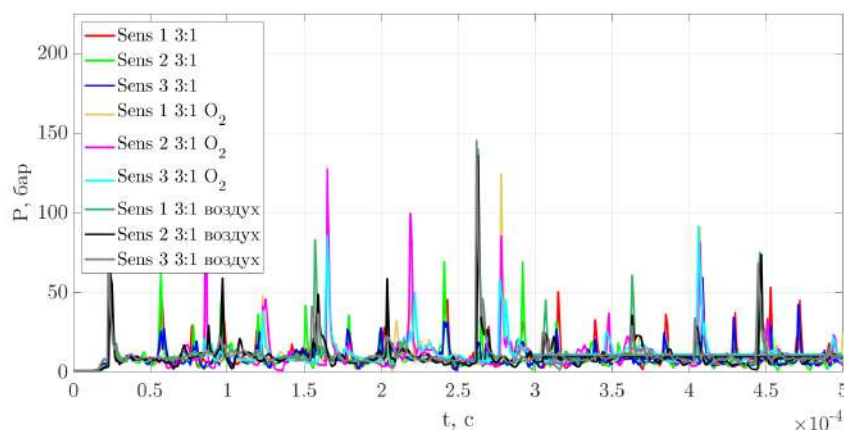


Рисунок 4.41 — Давление на “виртуальных датчиках” для богатой смеси.

Таблица 6 — Среднее давление на виртуальных датчиках для рассматриваемых случаев (бар).

Датчик	Бедная смесь			Стехиометрическая смесь			Богатая смесь		
	S1	S2	S3	S1	S2	S3	S1	S2	S3
Без дополнительной подачи	10.61	8.68	9.03	10.67	9.55	10.95	13.16	10.74	10.07
Кислород	10.23	8.39	8.27	11.08	9.47	10.43	11.75	10.10	9.82
Воздух	9.75	8.01	8.37	11.14	10.48	11.18	12.04	10.44	10.61

В результате исследования трех типов подачи водородно-воздушной смеси: бедная, стехиометрическая и богатая, установлено следующее. Максимальная реактивная сила тяги получается для богатой смеси, а максимальный удельный импульс — для бедной. Дополнительная подача кислорода или воздуха увеличивает удельный импульс для всех смесей, а тягу — преимущественно для богатой смеси. Происходит сокращение объема несгоревшего водорода в богатой смеси. При дополнительной подаче кислорода или воздуха происходит повышение давления в волне детонации и уменьшение количества волн. Во всех рассмотренных случаях в течение 1000 мкс сохраняется детонационный режим горения. Максимальная реактивная сила зафиксирована для богатой смеси с дополнительной подачей воздуха, а максимальный удельный импульс — для бедной смеси с дополнительной подачей воздуха.

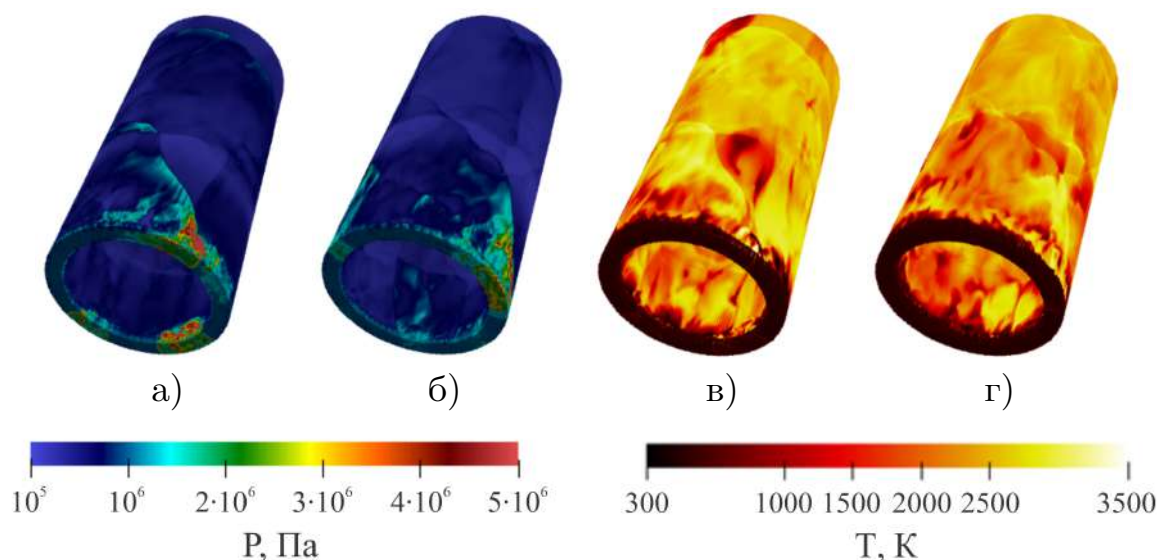


Рисунок 4.42 — Поля давления и температуры в различные моменты времени t для богатой смеси, полученные с 192 форсунками: давление - (а) в момент $t = 200$ мкс, (б) в момент $t = 400$ мкс, температура - (в) в момент $t = 200$ мкс, (г) в момент $t = 400$ мкс.

4.7 Влияние количества форсунок

Для оценки влияния количества форсунок на формирование детонации исследовалось течение в зазоре между коаксиальными цилиндрами длиной 20 см и с различными диаметрами: внешнего цилиндра 10 см, а внутреннего - 8 см. На торце канала располагались 192 форсунки с отверстиями радиусом 2 мм для подачи богатой смеси водорода с кислородом, а на внешнем и внутреннем цилиндрах располагались, соответственно, 68 и 56 форсунок радиусом 1.5 мм, предназначенных для дополнительной подачи кислорода. Все горючие смеси и окислители в начальном состоянии были с давлением 1 бар и температурой 300 К.

На рисунке 4.42 приведены поля давления и температуры для богатой смеси с дополнительной подачей кислорода, демонстрирующие устойчивое распространение вращающейся волны детонации.

Согласно расчетам с увеличенным в основной системе впрыска до 270 числом форсунок и уменьшенным до 15 мм радиусом форсунок с момента $t = 90$ мкс реализуется более устойчивое течение с двумя вращающимися детонационными волнами, следующими друг за другом. На рисунке 4.43 для

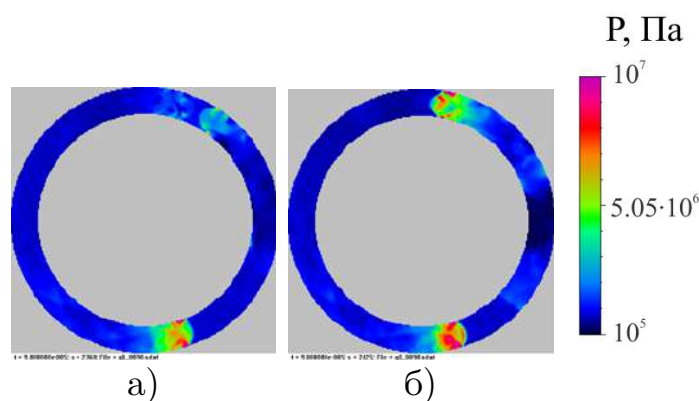


Рисунок 4.43 — Поля давления в поперечном сечении в момент $t = 90$ мкс: (а) 192 форсунки с радиусом 2 мм, (б) 270 форсунок с радиусом 1.5 мм.

сравнения показаны поля давления в поперечном сечении в момент времени $t = 90$ мкс, полученные в расчетах с числом форсунок (а) 192 и (б) 270.

Таким образом, увеличение количества форсунок в основной системе впрыска с 192 до 270, приводит к интенсификации процесса перемешивания смеси и повышению устойчивости детонационного процесса, и как результат — формирование двух вращающихся детонационных волн. Однако, в обоих случаях со временем разница нивелируется и наблюдается схожая картина с одной устойчивой волной. Это свидетельствует о том, что количество устойчиво вращающихся волн детонации определяется не только числом форсунок, но и геометрией области течения.

4.8 Зависимость от размеров внутреннего цилиндра

Данное исследование проводилось с целью установить влияние ширины канала на трехмерную структуру вращающейся волны детонации. Следующие результаты были получены для канала длиной 20 см и для нескольких значений радиуса внутреннего цилиндра. Изучены три случая: ширина канала $w = 1$ см (радиус внутреннего цилиндра 4 см), $w = 1.5$ см (радиус внутреннего цилиндра 3.5 см) и $w = 2$ см (радиус внутреннего цилиндра 3 см). Результаты показаны на рисунках: 4.44 (давление), 4.45 (температура), 4.46 (молярная доля водорода) и 4.47 (молярная доля кислорода). Все результаты приведены в поперечном сечении у места впрыска.

При увеличении ширины канала фронт детонационной волны начал изгибаться: чем шире канал, тем менее стабилен процесс. При $w = 1$ см сначала получались две волны, который трансформировались в одну вращающуюся волну. При $w = 1.5$ см сначала получались, как одна, так и две волны, которые также трансформировались в одну. При $w = 2$ см получались и сохранялись две волны.

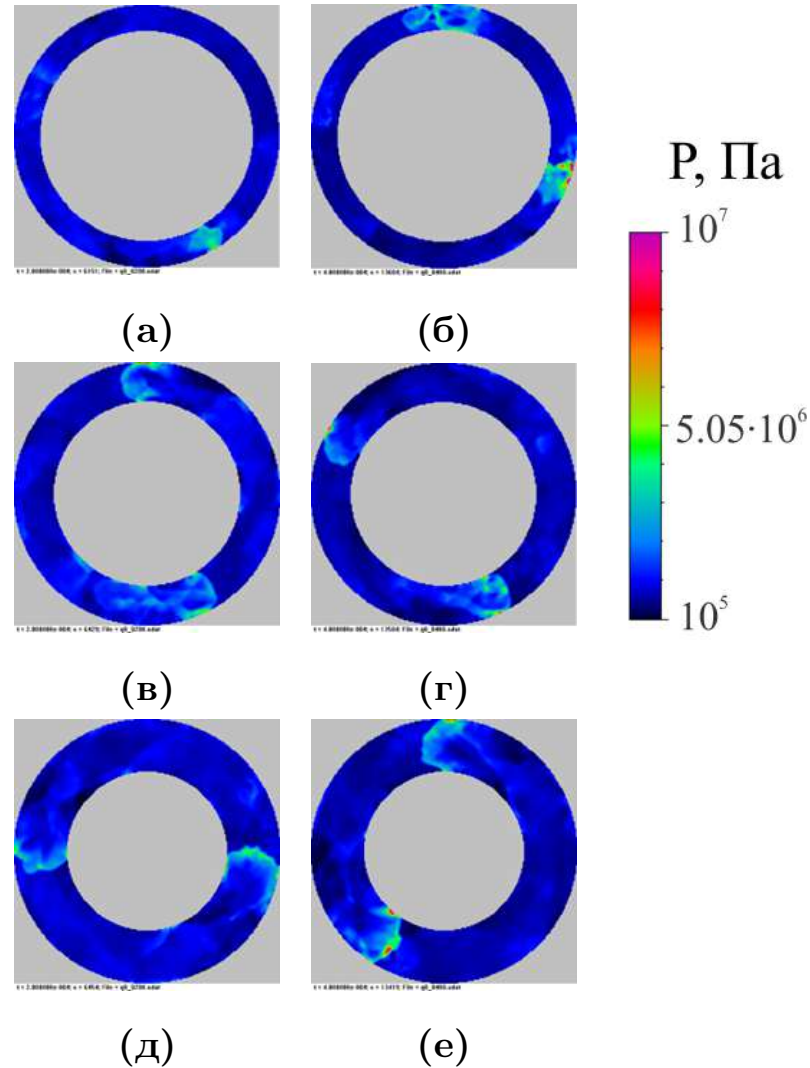


Рисунок 4.44 — Поле давления в поперечном сечении при различной ширине канала w и времени t : (а) $w = 1$ см, $t = 200$ мкс, (б) $w = 1$ см, $t = 400$ мкс, (в) $w = 1.5$ см, $t = 200$ мкс, (г) $w = 1.5$ см, $t = 400$ мкс, (д) $w = 2$ см, $t = 200$ мкс, (е) $w = 2$ см, $t = 400$ мкс.

Во всех рассмотренных вариантах с разной шириной канала был получен устойчивый режим вращающейся детонации. Согласно приведенным рисункам, у места впрыска присутствует достаточное количество реагентов для поддержания волны, однако эффективность их перемешивания существенно снижается с увеличением ширины канала при неизменном

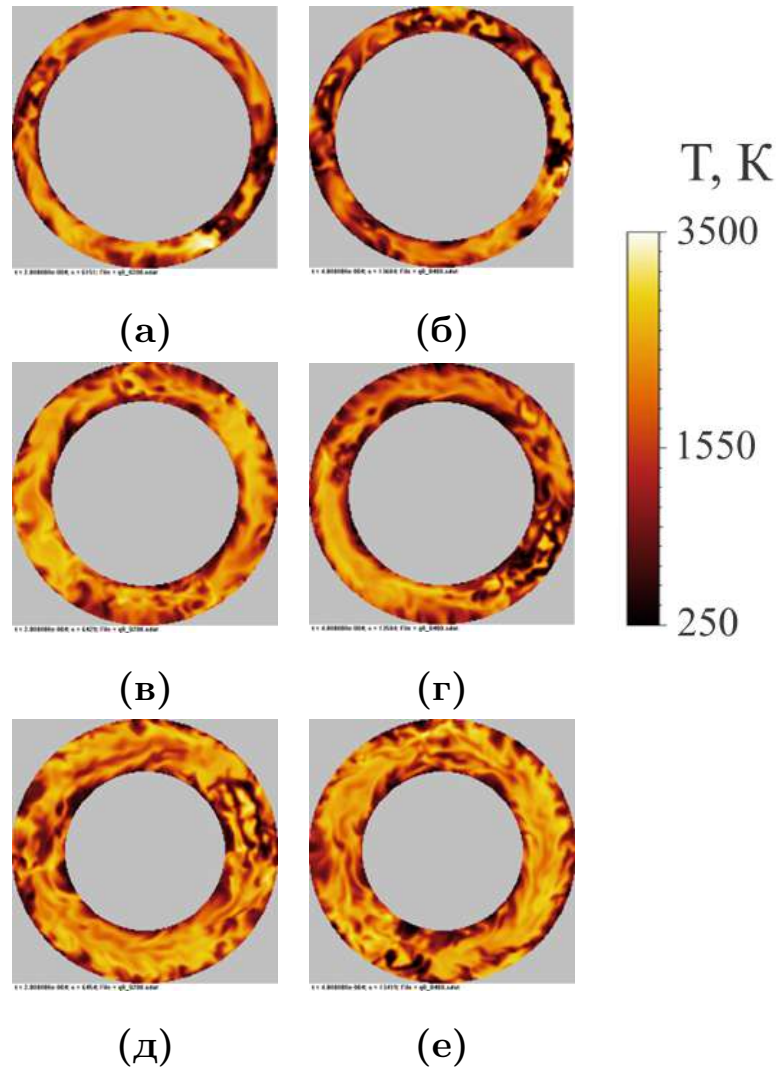


Рисунок 4.45 — Поле температуры в поперечном сечении при различной ширине канала w и времени t : (а) $w = 1$ см, $t = 200$ мкс, (б) $w = 1$ см, $t = 400$ мкс, (в) $w = 1.5$ см, $t = 200$ мкс, (г) $w = 1.5$ см, $t = 400$ мкс, (д) $w = 2$ см, $t = 200$ мкс, (е) $w = 2$ см, $t = 400$ мкс.

количестве форсунок. Большее расстояние между ними приводит к образованию зон с минимальным количеством смеси, где возможно затухание детонационной волны. Таким образом, увеличение ширины канала требует соответствующего изменения основной системы впрыска.

На рисунке 4.48 представлена сила тяги как функция времени для рассмотренных конфигураций. Хорошо видно, что сила тяги не стационарна, и ее величина колеблется около среднего значения 4700 Н.

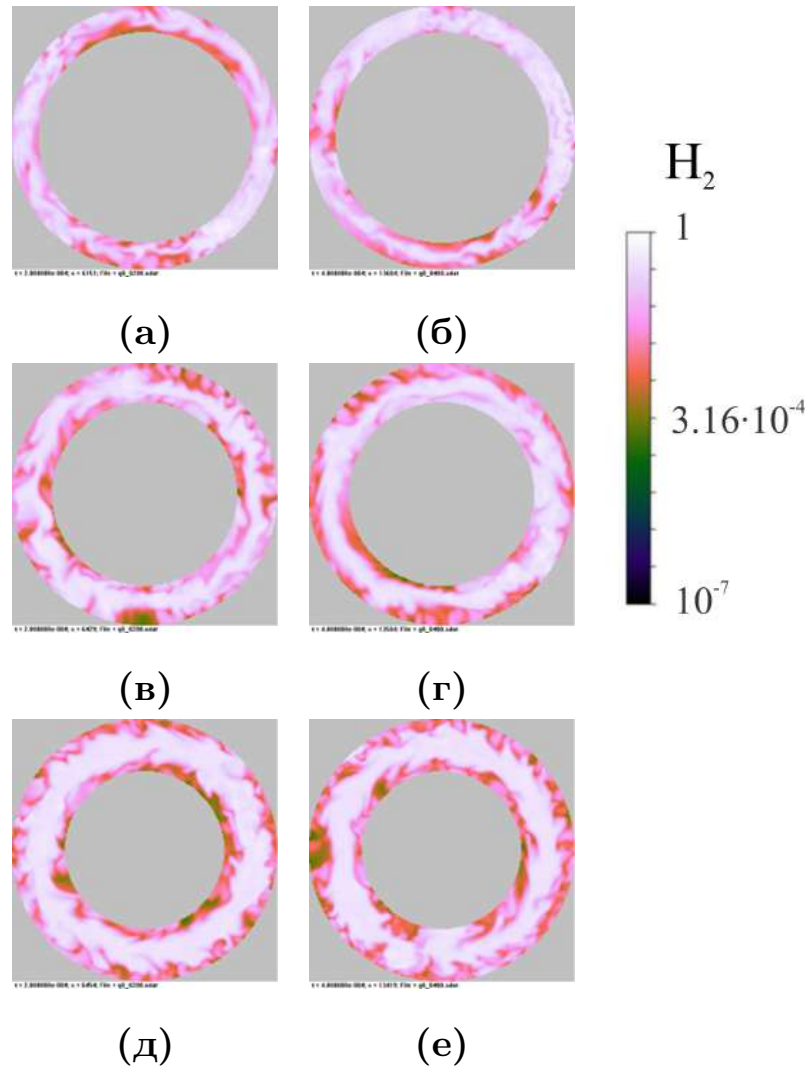


Рисунок 4.46 — Поле молярной доли горючего в поперечном сечении при различной ширине канала w и времени t : (а) $w = 1$ см, $t = 200$ мкс, (б) $w = 1$ см, $t = 400$ мкс, (в) $w = 1.5$ см, $t = 200$ мкс, (г) $w = 1.5$ см, $t = 400$ мкс, (д) $w = 2$ см, $t = 200$ мкс, (е) $w = 2$ см, $t = 400$ мкс.

4.9 Углеводородные смеси. Сокращенный кинетический механизм ацетилена

Для описания горения ацетилена был использован оригинальный упрощенный химико-кинетический механизм с участием следующих компонентов: C_2H_2 , CO , CO_2 , H_2 , O_2 , H_2O , OH , O , H , N_2 [345]. Рассматриваются следующие реакции (в таблице 7 приведены формулы, выражение скорости прямой реакции и источник):

Механизм состоит из одной необратимой реакции ацетилена с кислородом с образованием монооксида углерода и атомарного водорода,

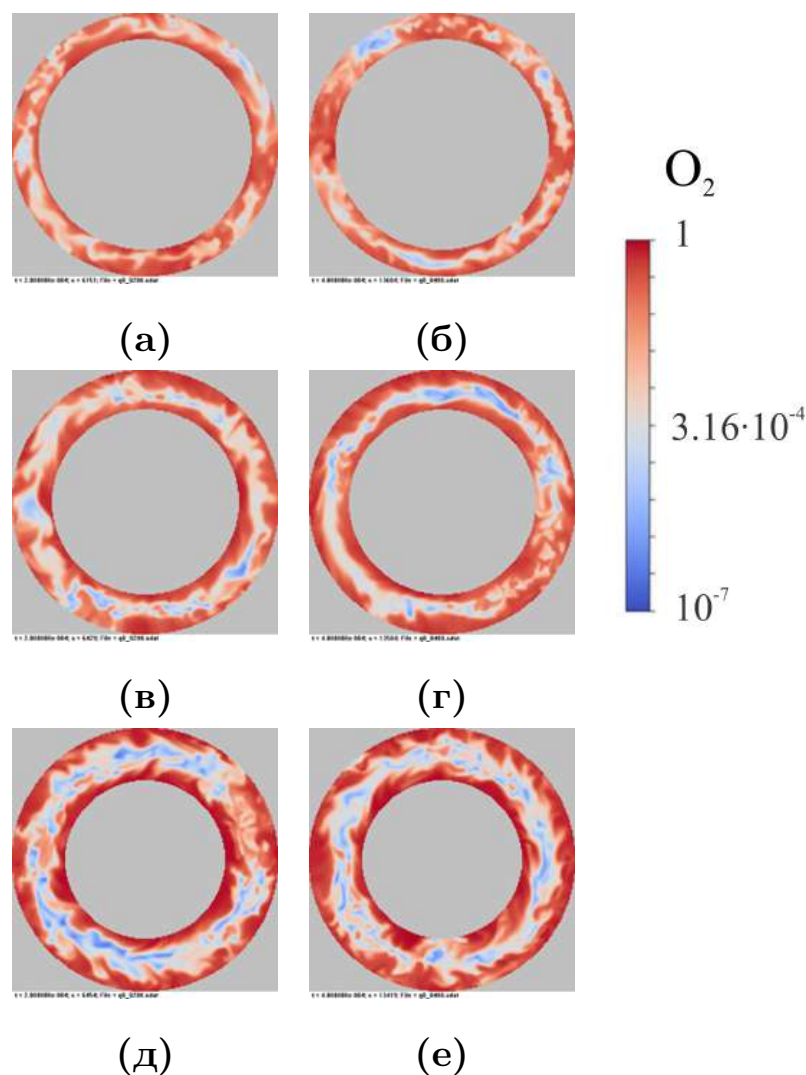


Рисунок 4.47 — Поле молярной доли окислителя в поперечном сечении при различной ширине канала w и времени t : (а) $w = 1$ см, $t = 200$ мкс, (б) $w = 1$ см, $t = 400$ мкс, (в) $w = 1.5$ см, $t = 200$ мкс, (г) $w = 1.5$ см, $t = 400$ мкс, (д) $w = 2$ см, $t = 200$ мкс, (е) $w = 2$ см, $t = 400$ мкс.

двух обратимых реакций монооксида углерода, взаимодействующего с кислородом или гидроксильным радикалом, образования радикалов при взаимодействии водорода с кислородом, четырех реакций обмена между водородом, кислородом водяным паром и радикалы, и три реакции рекомбинации между радикалами: атомарный водород, атомарный кислород и гидроксил. Всего используется 12 реакций, или 13 реакций, если рассматривать дублирующую реакцию как отдельную.

Тестирование работы кинетического механизма проводилось путем сравнения с работой расширенных кинетических механизмов, представленных в работах [220; 221] (рисунок 4.49 - 4.50).

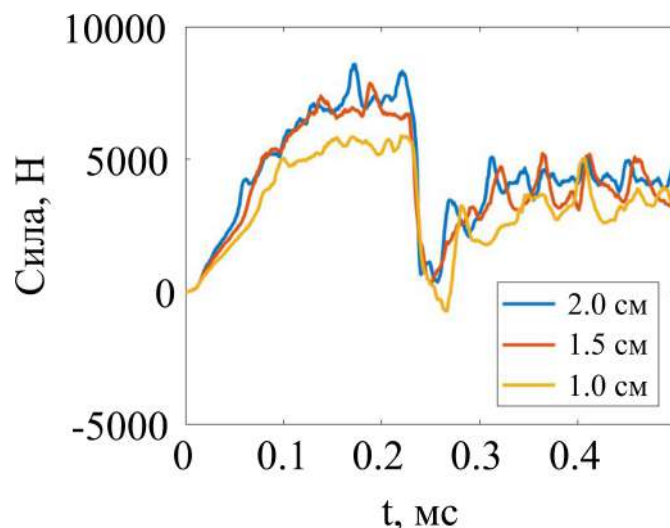


Рисунок 4.48 — Реактивная сила для канала шириной: $w = 2$ см, 1.5 см, 1 см.

Таблица 7 — Упрощенная кинетика ацетилена. Составы третьих тел следующие:

$$[M_1] = 3[C_2H_2] + 1.5[CO_2] + 6.5[H_2O] + 0.75[CO] + 0.4[O_2] + 0.4[N_2] + 1.0 \cdot [others]$$

$$[M_2] = 2.5[H_2] + 12[H_2O] + 1.0 \cdot [others]$$

1.	$C_2H_2 + O_2 \leftrightarrow 2CO + 2H$	$4.6 \cdot 10^{15} \cdot T^{-0.54} \cdot \exp(-188.32/RT)$	Wang & Laskin, 1998
2.	$CO + O_2 \leftrightarrow CO_2 + O$	$1.119 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-47.70/RT)$	GriMech 3.0, 1999
3a.	$CO + OH \leftrightarrow CO_2 + H$	$7.046 \cdot 10^4 \cdot T^{2.053} \cdot \exp(0.355/RT)$	idem
3b.	$CO + OH \leftrightarrow CO_2 + H$	$5.757 \cdot 10^{12} \cdot T^{-0.664} \cdot \exp(-0.332/RT)$	idem
4.	$H_2 + O_2 \leftrightarrow 2OH$	$3.00 \cdot 10^{11} \cdot \exp(-167.4/RT)$	Tereza et al., 2016
5.	$H + O_2 \leftrightarrow O + OH$	$2.00 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-70.3/RT)$	Maas & Pope, 1992
6.	$O + H_2 \leftrightarrow H + OH$	$5.06 \cdot 10^4 \cdot T^{2.67} \cdot \exp(-26.3/RT)$	idem
7.	$OH + H_2 \leftrightarrow H + H_2O$	$1.00 \cdot 10^8 \cdot T^{1.6} \cdot \exp(-13.8/RT)$	idem
8.	$2OH \leftrightarrow O + H_2O$	$1.50 \cdot 10^9 \cdot T^{1.14} \cdot \exp(-0.4/RT)$	idem
9.	$2H + M \leftrightarrow H_2 + M$	$1.8 \cdot 10^{18} \cdot T^{-1.0}$	Maas & Pope, 1992
10.	$2O + M \leftrightarrow O_2 + M$	$2.90 \cdot 10^{17} \cdot T^{-1.0}$	idem
11.	$H + OH + M \leftrightarrow H_2O + M$	$2.20 \cdot 10^{22} \cdot T^{-2.0}$	idem
12.	$O + H + M \leftrightarrow OH + M$	$4.71 \cdot 10^{18} \cdot T^{-1.0}$	Hong, 2010

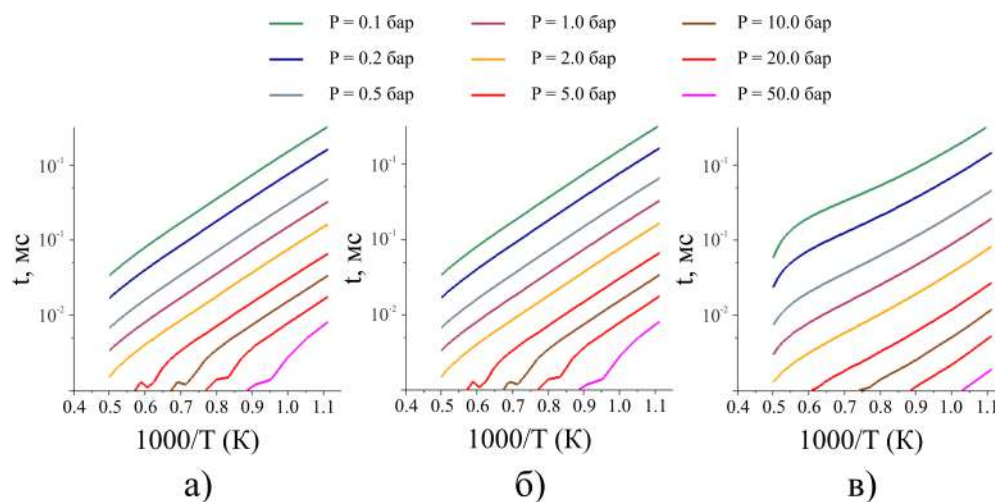


Рисунок 4.49 — Времена задержки самовоспламенения (ацетилен с воздухом) при различных давлениях для трех различных кинетических механизмов: а) кинетический механизм из работы [221], б) кинетический механизм из работы [220], в) упрощённая кинетика ацетилена.

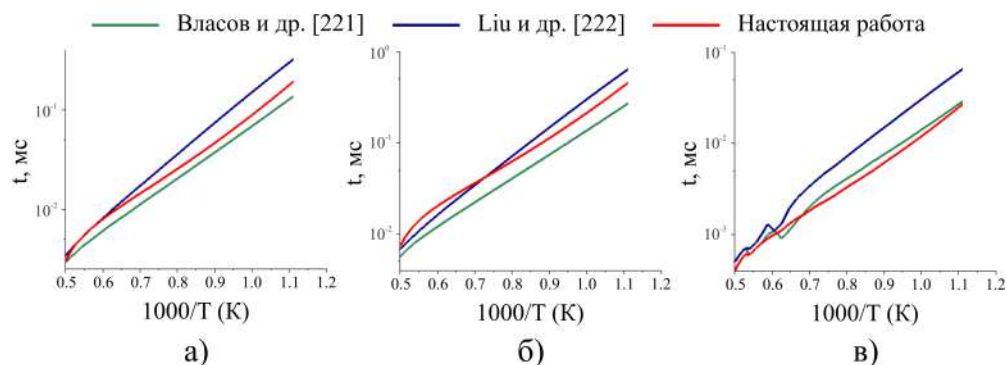


Рисунок 4.50 — Времена задержки самовоспламенения в зависимости от температуры. Для различных кинетических механизмов и для различных давлений: а) 0.1 бар б) 1 бар в) 5 бар.

На рисунке 4.50 приведена зависимость температуры от времени при различных давлениях для кинетического механизма, представленного в [220], содержащего 39 компонентов 230 реакций, показанная на графике синим цветом, для кинетического механизма [221], содержащего 58 компонентов 415 реакций, на графике зеленым цветом, а для сокращенного кинетического механизма, содержащего 10 компонентов 12 реакций, она показана на графике голубым цветом. Видно, что в соответствии с этой зависимостью положение кривой для сокращенного кинетического механизма находится между кривыми для расширенных кинетических механизмов.

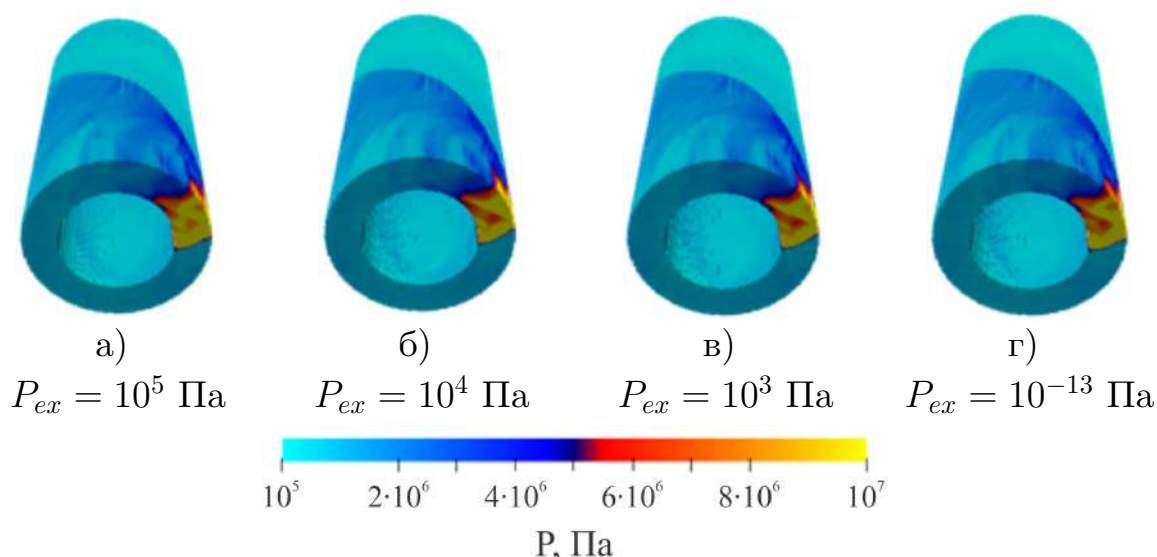


Рисунок 4.51 — Поле давления в момент $t = 200$ мкс в канале длиной 10 см

4.10 Влияние внешнего давления

Будем исследовать течение при следующих параметрах системы впрыска: количество форсунок в основной системе впрыска – 72, на внутренней стенке канала – 24, а на наружной - 28 форсунок. Горючая смесь подается из основной системы с давлением торможения 15 бар и температурой торможения 258 К, а из вспомогательной с давлением торможения 5 бар и температурой торможения 258 К. Состав исследуемой ацетилено-кислородной смеси: $[C_2H_2]:[O_2] = 1:1.5$ (богатая смесь).

Расчеты проводились для канала длины : а) 10 см и б) 5 см при четырех значениях внешнего давления: 1) $P_{ex} = 10^5$ Па; 2) $P_{ex} = 10^4$ Па; 3) $P_{ex} = 10^3$ Па; 4) $P_{ex} = 10^{-13}$ Па.

На рисунках 4.51 и 4.52 показано поле давления в канале для двух рассматриваемых конфигураций канала при различных значениях внешнего давления. Во всех случаях видна детонационная волна, примыкающая к торцу канала, с которого подается горючая смесь.

На рисунках 4.53 и 4.54 показано поле температуры в канале для двух рассматриваемых конфигураций канала при различных значениях внешнего давления.

На рисунке 4.54 в окрестности торца канала видны области с низкой температурой, в которых находится подающаяся из форсунок горючая

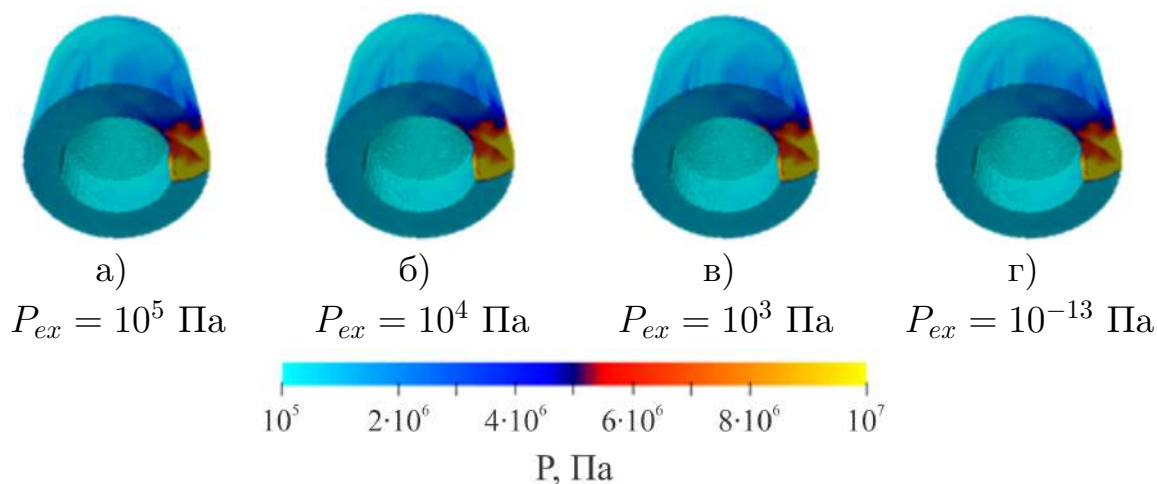


Рисунок 4.52 — Поле давления в момент $t = 200$ мкс. в канале длиной 5 см

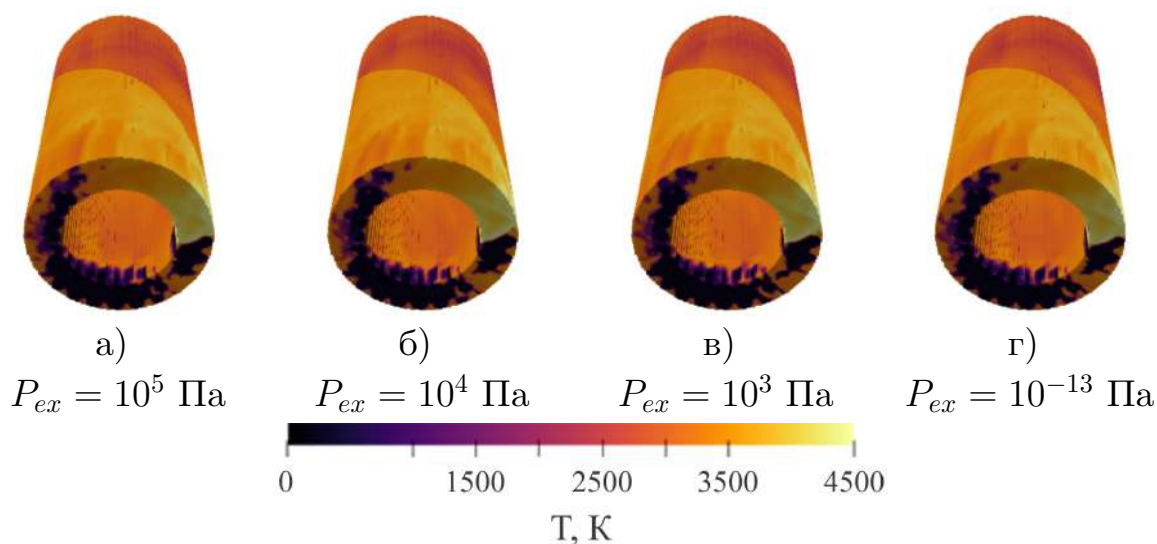


Рисунок 4.53 — Поле температуры в момент $t = 200$ мкс в канале длиной 10 см

смесь. Волне детонации соответствует зона повышенной температуры продуктов горения.

На рисунке 4.55 представлена зависимость реактивной силы от времени при четырех значениях внешнего давления для канала длиной 10 см.

Средние по времени значения реактивной силы в канале 10 см составляют: 1) 2249 Н для $P_{ex} = 10^5$ Па; 2) 2309 Н для $P_{ex} = 10^4$ Па; 3) 2307 Н для $P_{ex} = 10^3$ Па; 4) 2314 Н для $P_{ex} = 10^{-13}$ Па.

На рисунке 4.56 показано изменение со временем удельного импульса при четырех значениях внешнего давления для канала длиной 10 см.

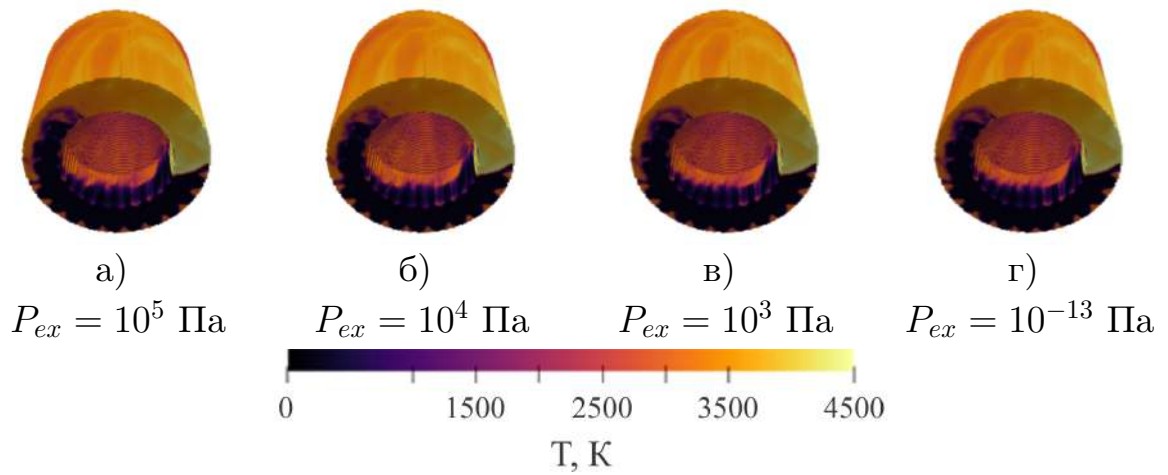


Рисунок 4.54 — Поле температуры в момент $t = 200$ мкс. в канале длиной 5 см

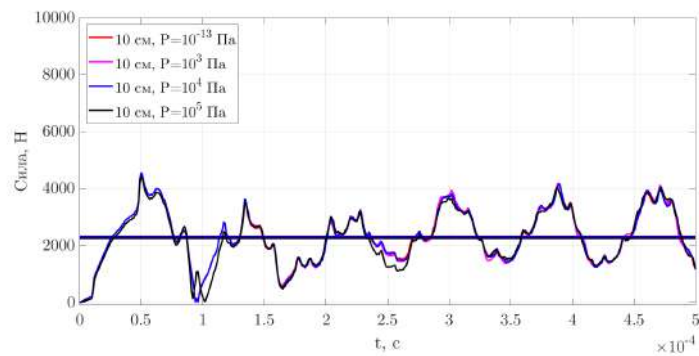


Рисунок 4.55 — Зависимость реактивной силы от времени для канала длиной 10 см.

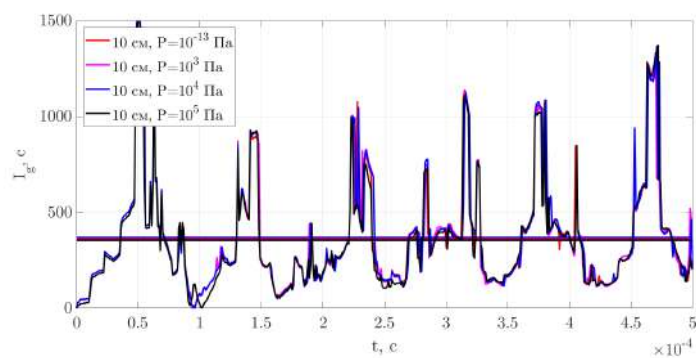


Рисунок 4.56 — Изменение со временем удельного импульса для канала длиной 10 см.

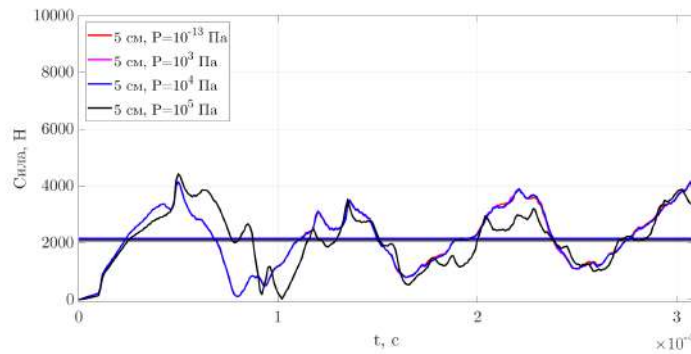


Рисунок 4.57 — Изменение со временем реактивной силы для канала длиной 5 см.

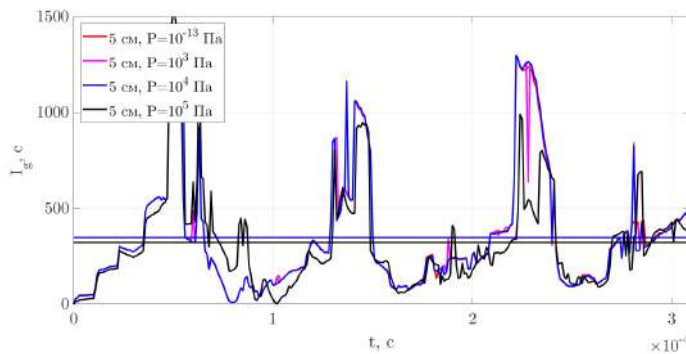


Рисунок 4.58 — Изменение со временем удельного импульса для канала длиной 5 см.

Средние по времени значения удельного импульса для канала длиной 10 см составляют: 1) 355 с для $P_{ex} = 10^5$ Па; 2) 370 с для $P_{ex} = 10^4$ Па; 3) 368 с для $P_{ex} = 10^3$ Па; 4) 364 с для $P_{ex} = 10^{-13}$ Па.

На рисунке 4.57 показано изменение со временем реактивной силы при четырех значениях внешнего давления для канала длиной 5 см.

Средние по времени значения тяги для канала длиной 5 см составляют: 1) 2073 Н для $P_{ex} = 10^5$ Па; 2) 2147 Н для $P_{ex} = 10^4$ Па; 3) 2149 Н для $P_{ex} = 10^3$ Па; 4) 2154 Н для $P_{ex} = 10^{-13}$ Па.

На рисунке 4.58 показано развитие удельного импульса во времени для четырех различных внешних давлений для канала длиной 5 см. и На рисунке 4.58 показано изменение со временем удельного импульса при четырех значениях внешнего давления для канала длиной 5 см.

Средние по времени значения удельного импульса для канала длиной 5 см составляют: 1) 321 с для $P_{ex} = 10^5$ Па; 2) 349 с для $P_{ex} = 10^4$ Па; 3) 348 с для $P_{ex} = 10^3$ Па; 4) 347 с для $P_{ex} = 10^{-13}$ Па.

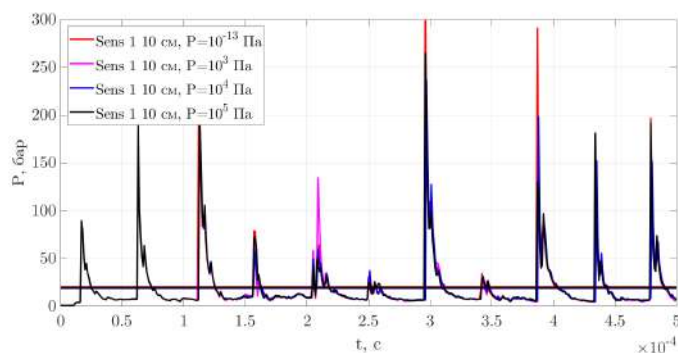


Рисунок 4.59 — Зависимость давления от времени в “виртуальном” датчике для канала длиной 10 см.

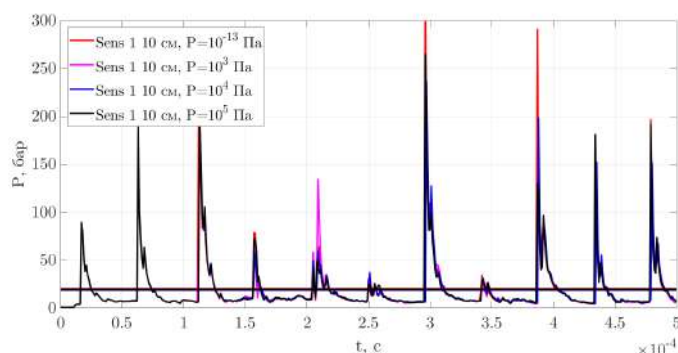


Рисунок 4.60 — Зависимость давления от времени в “виртуальном” датчике для канала длиной 5 см

На рисунке 4.59 для канала длиной 10 см и рисунке 4.60 для канала длиной 5 см изображена зависимость от времени давления в виртуальном датчике, расположенном на расстоянии 0.5 см от торца канала.

Из представленных рисунков зависимости давления в датчике видно, что изменение внешнего давления не оказывает сильного влияния на давление в зоне основной системы впрыска, а реактивная сила значительно изменяется. Реактивная сила изменяется таким образом, что на коротких соплах приращение за счет изменения внешнего давления больше на рассматриваемом интервале. На коротком сопле - 2073 Н при нормальном давлении и 2154 Н при низком давлении, изменение 81 Н; для длинного канала - 2249 Н для нормального давления и 2314 Н для низкого давления, изменение 65 Н. Таким образом чем короче канал, тем больше влияние внешнего давления.

При уменьшении внешнего давления увеличиваются средние характеристики: реактивная сила и удельный импульс. Средние характеристики у

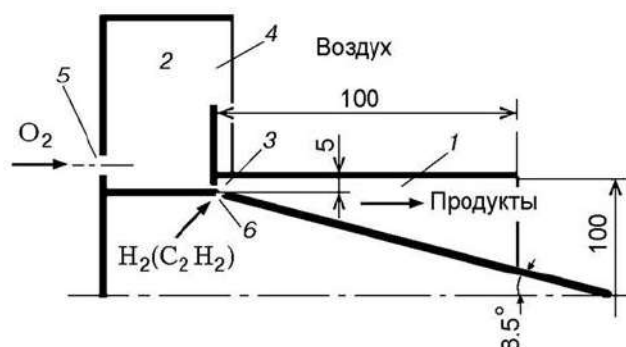


Рисунок 4.61 — Осовое сечение канала, исследуемого в работе Ф.А. Быковского и др. [222]: 1 — трехмерный канал, 2 — объем для кислорода, 3 — щель для подачи кислорода в канал, 4 — кольцевое отверстие, 5 — отверстие для подачи кислорода в объем 2, 6 — форсунка горючего.

канала длиной 10 см примерно на 9.5% выше, чем у более короткого канала длиной 5 см.

4.11 Сравнение с экспериментальными данными

В данном разделе было проведено численное исследование канала аналогичного каналу в работе [222]. Геометрия канала представлена на рисунке 4.61.

Далее рассматривается осесимметричный кольцевой канал диаметром 10 см и длиной 10 см, начальная ширина канала 0.5 см. Вниз по потоку канал расширяется под углом 8.5°. Предполагается, что смесь подается перемешанной в кольцевой зазор. Первоначально канал заполнен воздухом при давлении 1 бар и температуре 300 К. В начальный момент времени в канал поступает смесь ацетилена с кислородом через кольцевой зазор. Смесь воспламеняется подводом дополнительной энергии в шарообразную область радиусом 2.5 мм в течение 1 мкс с мощностью 105 кВт/см³, что соответствует суммарной энергии 6.2 Дж. Воспламенение осуществляется через 10 мкс после начала процесса подачи смеси. Для описания горения ацетилена использовался упрощенный химико-кинетический механизм с участием следующих частиц: C₂H₂, CO, CO₂, H₂, O₂, H₂O, OH, O, H, N₂. Азот считается нейтральным. Соотношение смешивания [C₂H₂]:[O₂]=1:2.

Было рассмотрено 2 случая давления торможения: 1) 5 бар и 2) 10 бар, температура $T = 258$ К.

На рисунке 4.62 представлено поле давления в сечении Oyz на расстоянии 0.5 см от торца канала. В начальный момент времени направление движения волны задается против часовой стрелки специальным распределением подачи горючей смеси (ссылка описания открытия). Видно, что в момент времени 150 мкс для обоих случаев направление движения волны детонации сохранилось (рисунок 4.62(а,б)). В момент времени 400 мкс для случая 5 бар, наблюдаем изменение направление вращения детонационной волны (рисунок 4.62(в)). Это происходит за счет взаимодействия детонационной волны со скачком вызванным образованием взрыва во взрыве. В этот же момент времени для случая 10 бар (рисунок 4.62(г)) устойчивая волна затухла, но произошло вторичное инициирование, т.е. реинициирование детонации в смеси и в результате в канале образуются две встречные детонационные волны. В момент времени 500 мкс наблюдается одна детонационная волна и для 5 бар (рисунок 4.62(д)), а для 10 бар - 2 детонационные волны, следующие друг за другом, одна из них затухает в результате недостатка свежей смеси (рисунок 4.62(з)) и на момент 800 мкс существует одна волна детонации. На тот же момент времени в случае давления 5 бар, остается одна волна детонации (рисунок 4.62(ж)). Данная тенденция для обоих случаев сохраняется до момента 1500 мкс.

На рисунке 4.63 представлена зависимость реактивной силы от времени для двух рассмотренных случаев подачи смеси. Среднее значение реактивной силы составило 960 Н при давлении 5 бар, для случая давления 10 бар – 2150 Н.

С целью сравнения с экспериментальными данными был проведен расчет при следующих параметрах подачи 5 бар и 10 бар. В результате расчетов 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 $\varphi = 1.25$, скорость волны составила $D = 1.85$ км/с. В эксперименте было получено при $\varphi = 1.2 \rightarrow 1.06$, $D = 1.46 \rightarrow 1.2$ км/с. Отличие скорости связано с тем, что в расчетном эксперименте давление торможения не уменьшалось со временем, не было учета потерь на стенках за

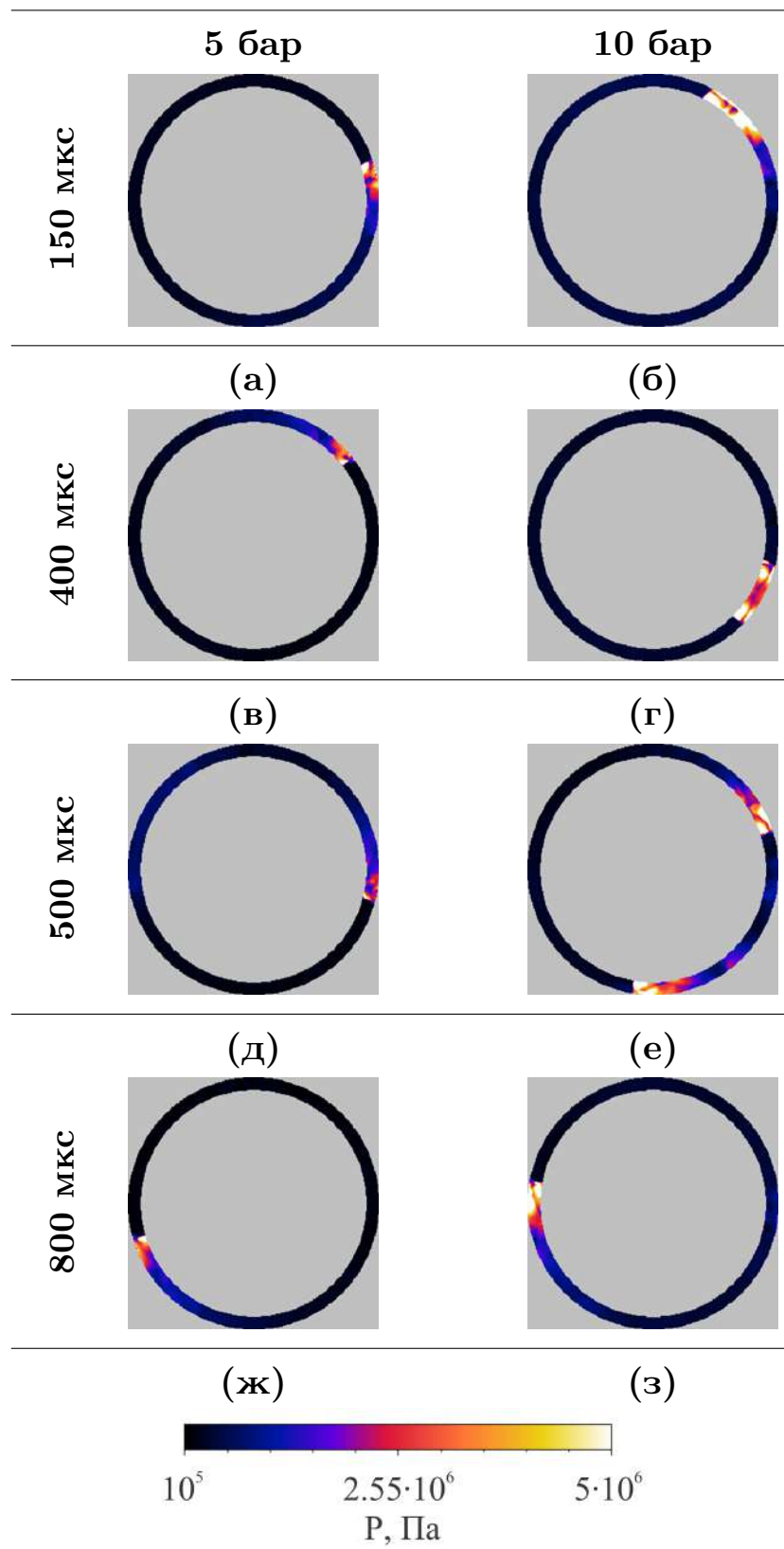


Рисунок 4.62 — Поле давления в плоскости Oyz в моменты времени: 150 мкс, 400 мкс, 500 мкс, 800 мкс при подаче смеси с давлением 1) 5 бар, 2) 10 бар

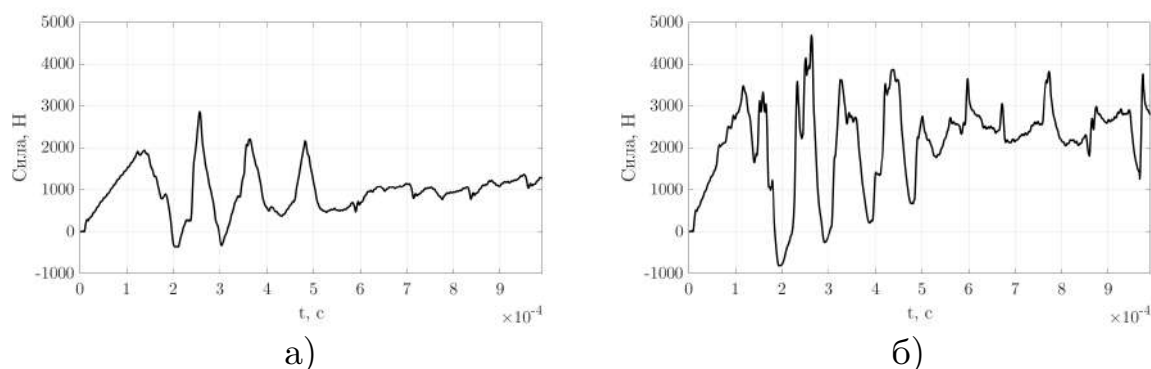


Рисунок 4.63 — Зависимость реактивной силы от времени для канала при давлении а) 5 бар б) 10 бар

счет охлаждения, а также учета раздельной подачи горючего и окислителя. Проводилось исследование возможности использования авторского сокращенного кинетического механизма для расчета подобного рода систем. В результате расчета, проведенного в канале, получено, что на данных интервалах времени в период установления процесса большую часть времени в канале наблюдается одномодовый режим, что в целом совпадает с результатами экспериментов. Вопрос о переходе в импульсный режим требует дополнительных исследований. Для более точного сравнения необходимо ввести в систему учет потерь на стенках за счет охлаждения, а также раздельную подачу горючего и окислителя.

4.12 Выводы к третьей главе

В ходе серии трехмерных расчётов течений с вращающейся детонационной волной, распространяющейся по водородно-кислородной смеси в канале между двумя коаксиальными цилиндрами изучены ключевые факторы формирования и устойчивости процесса. Предложен метод управляемого запуска детонационной волны с заданным направлением вращения. Исследование показало, что увеличение количества форсунок на торцевой стенке канала улучшает перемешивание компонентов и повышает устойчивость детонационного процесса на начальном этапе, что приводит к формированию двух вращающихся детонационных волн. Однако в ходе развития процесса разница между конфигурациями уменьшается, и в ито-

ге в обоих случаях устанавливается схожая картина с одной устойчивой волной, что свидетельствует о влиянии геометрии расположения инжекторов преимущественно на начальную стабильность, а не на финальный установившийся режим. При этом большее расстояние между форсунками способствует образованию зон с обедненной смесью, где возможно затухание детонационной волны, что указывает на необходимость пересмотра и расширения системы форсунок при увеличении ширины канала. Затухание волны на стадии ее запуска обусловлено внутренней начальной неустойчивостью, возникающей при столкновении с встречной волной, образовавшейся после инициирования. Установлено, что оптимальные тяговые характеристики получаются при использовании бедной горючей смесью, что связано с более устойчивым поведением волны и отсутствием дополнительных очагов детонации из-за меньшей реакционной способности смеси. Получено, что боковая подача кислорода или водорода, с одной стороны, может ослаблять встречную волну, влияющую на запуск, и способствовать повышению полноты сгорания топлива, но с другой стороны, может как создавать дополнительные неустойчивости и условия для локальных взрывов, способных ослабить головную детонационную волну, так и подавляет их.

Установлено, что использование предложенного сокращенного кинетического механизма для смеси ацетилен-кислород позволяет значительно ускорить проведение расчетов.

В ходе проведенного исследования получены новые данные о переходных процессах при иницировании вращающейся детонации в ацетилен-кислородной смеси в каналах различных конфигураций и получены устойчивые детонационные волны во всем исследованном диапазоне геометрических параметров. Согласно расчетам, понижение давления окружающей среды приводит к росту реактивной силы и удельного импульса.

Полученные качественные закономерности (наличие однонаправленной вращающейся детонации на установившихся участках времени) согласуются с наблюдаемыми в экспериментах явлениями [64]. Количественное сравнение для случая с давлением подачи 5 бар (наиболее близкого к экспериментальным условиям) показало, что расчетная скорость волны детонации составила 1.85 км/с при коэффициенте избытка топлива $\varphi = 1.25$. Это несколько выше экспериментальных значений ($1.46 \rightarrow 1.2$ км/с при

$\varphi = 1.2 \rightarrow 1.06$), что указывает на необходимость дальнейшего уточнения модели.

Таким образом, предложенная численная модель и кинетический механизм адекватно описывают основные газодинамические закономерности и тренды, наблюдаемые в эксперименте. Для повышения точности прогнозирования в будущем требуется усовершенствование модели путем учета тепловых потерь на стенках и условий раздельной подачи компонентов топлива.

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 ацетилен 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.

В заключение автор выражает благодарность и большую признательность научному руководителю Смирнову Н. Н. за поддержку, помощь, обсуждение результатов и научное руководство.

Список литературы

1. *Денисов Ю. Н., Трошин Я. К.* Пульсирующая и спиновая детонация газовых смесей в трубах // Доклады Академии наук СССР. — 1959. — Т. 125, № 1. — С. 110—113.
2. *Щелкин К. И., Трошин Я. К.* Газодинамика горения. — Москва : Издательство Академии наук СССР, 1963. — С. 255.
3. *White D.* Turbulent Structure of Gaseous Detonation // Physics of Fluids. — 1961. — Т. 4. — С. 465—480.
4. *Nagaishi T., Yoneda K., Hikita T.* On the Structure of Detonation Waves in Gases // Combustion and Flame. — 1971. — Т. 16, № 1. — С. 35—38.
5. *Edwards D. H., Hooper G., Meddins R. J.* Instabilities in the Reaction Zones of Detonation Waves // Astronautica Acta. — 1972. — Т. 17, № 4/5. — С. 475—485.
6. *Strehlow R., Crooker A.* The Structure of Marginal Detonation Waves // Acta Astronautica. — 1974. — Т. 1. — С. 303—315.
7. *Takai R., Yoneda K., Hikita T.* Study of Detonation Wave Structure // Proceedings of the 15th Symposium (International) on Combustion. — Pittsburgh, PA : The Combustion Institute, 1974. — С. 69—78.
8. *Субботин В. А.* Два типа структуры поперечных волн в многофронтной детонации // Физика горения и взрыва. — 1975. — Т. 11, № 1. — С. 96—102.
9. *Мутрофанов В. В.* Теория детонаций. — Новосибирск : НГУ, 1982. — С. 91.
10. *Vasiliev A. A., Nikolaev Y.* Closed Theoretical Model of a Detonation Cell // Acta Astronautica. — 1978. — Т. 5, № 11/12. — С. 983—996.
11. *Lundstrom E. A., Oppenheim A. K.* On the Influence of Non-Steadiness on the Thickness of the Detonation Wave // Proceedings of the Royal Society of London A. — 1969. — Т. 310, № 1503. — С. 463—478.

12. *Dormal M., Libouton J. C., Van Tiggelen P.* Evolution of Induction Time in Detonation Cells // *Acta Astronautica*. — 1979. — Т. 6, № 7/8. — С. 875—888.
13. *Strehlow R.* The Nature of Transverse Waves in Detonations // *Astronautica Acta*. — 1969. — Т. 14. — С. 539—548.
14. *Libouton J. C., Jacques A., Van Tiggelen P.* Cinétique, structure et entretien des ondes de détonation // *Actes du Colloque International Berthelot-Vieille-Mallard-Le Chatelier*. Т. 2. — Bordeaux, 1981. — С. 437—442.
15. *Shepherd J. E.* The Chemical Kinetics of Hydrogen-Air-Diluent Detonations // *Progress in Astronautics and Aeronautics*. Т. 106. — 1986. — С. 263—293.
16. *Ульяницкий В. Ю.* // *Физика горения и взрыва*. — 1981. — Т. 17. — С. 227.
17. *Щелкин К. И.* // *Успехи физических наук*. — 1965. — Т. 87. — С. 273—302.
18. *Манжале́й В. И.* // *Физика горения и взрыва*. — 1977. — Т. 13. — С. 470—472.
19. *Bull D. C.* и др. Detonation Structure Studies // *Combustion and Flame*. — 1982. — Т. 45. — С. 7—22.
20. *Васильев А. А., Митрофанов В. В., Топчан М. Е.* // *Физика горения и взрыва*. — 1987. — Т. 23. — С. 109—131.
21. *Gamezo V. N.* и др. Fine Cellular Structures Produced by Marginal Detonations // *Proceedings of the Combustion Institute*. Т. 28. — 2000. — С. 611—617.
22. *Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В.* Трехмерная ячеистая детонация в цилиндрических каналах // *Доклады Российской Академии наук*. — 2015. — Т. 460, № 1. — С. 35—38.
23. *Марков В. В.* Численное моделирование образования многофронтной структуры детонационной волны // *Доклады Академии наук СССР*. — 1981. — Т. 258, № 2. — С. 314—317.

24. *Марков В. В.* О математическом моделировании нестационарных процессов при детонации в газах // II Всесоюзная конференция “Лаврентьевские чтения”. Тезисы докладов. — Киев, 1985. — С. 157—158.
25. *Сабельников В. А.* и др. Объяснение роста скорости самоподдерживающейся детонации при её распространении вверх по потоку в канале с пограничными слоями // Горение и взрыв. — 2020. — Т. 13, № 4. — С. 62—74.
26. *Сабельников В. А.* и др. Новые результаты исследований распространения детонации в вязком турбулентном течении в канале // Advances in Detonation Research. — Moscow : Torus Press, 2022. — С. 23—25.
27. *Shepherd J. E.* и др. Analysis of the Cellular Structure of Detonations // Proceedings of the 21st Symposium (International) on Combustion. — The Combustion Institute, 1986. — С. 1649—1657.
28. *Gavrikov A. I., Efimenko A. A., Dorofeev S. B.* A Model for Detonation Cell Size Prediction from Chemical Kinetics // Combustion and Flame. — 2000. — Т. 120, № 1/2. — С. 19—33.
29. *Medvedev S. P., Anderzhanov E. K., Cherepanov A. A.* и др. Shock Waves during Detonation of Hydrogen–Air Mixture Confined by a Movable Thin-Walled Shell // Russian Journal of Physical Chemistry B. — 2025. — Т. 19. — С. 1353—1359.
30. *Тереза А. М.* и др. Влияние выбора кинетического механизма на динамику роста давления при численном моделировании воспламенения и сгорания водородно-воздушных смесей // Горение и взрыв. — 2024. — Т. 17, № 3. — С. 3—11.
31. *Tereza A. M., Agafonov G. L., Anderzhanov E. K.* и др. The Role of Third-Body Collision Efficiency in Autoignition of Hydrogen–Air Mixtures // Russian Journal of Physical Chemistry B. — 2024. — Т. 18. — С. 965—972.
32. *Medvedev S. P., Khomik S. V., Maximova O. G.* и др. Imitation of the Explosion Effects in a Shock Tube with a Focusing Element // Russian Journal of Physical Chemistry B. — 2023. — Т. 17. — С. 962—966.

33. *Tereza A. M., Agafonov G. L., Anderzhanov E. K. и др.* Numerical Simulation of the Thermal Conversion of Gaseous Products of Polypropylene Pyrolysis // Russian Journal of Physical Chemistry B. — 2021. — Т. 15. — С. 995—1004.
34. *Tereza A. M., Agafonov G. L., Betev A. S. и др.* Reduction of the Detailed Kinetic Mechanism for Efficient Simulation of Ignition Delay for Mixtures of Methane and Acetylene with Oxygen // Russian Journal of Physical Chemistry B. — 2020. — Т. 14. — С. 951—958.
35. *Malik K., Zbikowski M., Teodorczyk A.* Detonation Cell Size Model Based on Deep Neural Network for Hydrogen, Methane and Propane Mixtures with Air and Oxygen // Nuclear Engineering and Technology. — 2019. — Т. 51. — С. 424—431.
36. *Radulescu M. I., Lee J. H. S.* The Failure Mechanism of Gaseous Detonations: Experiments in Porous Wall Tubes // Combustion and Flame. — 2002. — Т. 131, № 1/2. — С. 29—46.
37. *Zhang B.* // Combustion and Flame. — 2016. — Т. 169. — С. 333—339.
38. *Zhang B., Liu H., Yan B.* Investigation on the Detonation Propagation Limit Criterion for Methane-Oxygen Mixtures in Tubes with Different Scales // Fuel. — 2019. — Т. 239. — С. 617—622.
39. *Левин В. А., Журавская Т. А.* Гашение детонационного горения водородно-воздушной смеси в плоском канале // Письма в журнал технической физики. — 2023. — Т. 49, № 18. — С. 42—46.
40. *Yakush S., Semenov O., Alexeev M.* Premixed Propane-Air Flame Propagation in a Narrow Channel with Obstacles // Energies. — 2023. — Т. 16. — С. 1516.
41. *Yakush S. и др.* Features of Hydrogen-Enriched Methane-Air Flames Propagating in Hele-Shaw Channels // Energies. — 2025. — Т. 18. — С. 335.
42. *Golovastov S. V., Bivol G. Y., Golub V. V.* Influence of Porous Walls on Flame Acceleration and Flame Front Perturbations in Methane-Air and Acetylene-Air Mixtures // Fuel. — 2021. — Т. 292. — С. 120232.

43. *Lv X. и др. The Quenching and Attenuation of Hydrogen-Air Detonation after Passing across Capillaries // Fuel. — 2022. — Т. 324. — С. 124535.*
44. *Medvedev S. P., Maximova O. G., Cherepanova T. T. и др. Detonation Propagation and Quenching in a Semi-Confined Layer of a Hydrogen-Air Mixture // Russian Journal of Physical Chemistry B. — 2022. — Т. 16. — С. 1112—1116.*
45. *Васильев А. А., Васильев В. А. Ослабление детонационных волн азотом и углекислым газом: метановые и водородные смеси // Физика горения и взрыва. — 2025. — Т. 61, № 2. — С. 18—24.*
46. *Денисов Е. Т., Азатян В. В. Ингибирование цепных реакций. — Черноголовка, 1996. — С. 268.*
47. *Коробейничев О. П., Шмаков А. Г., Шварцберг В. М. Физика и химия ингибирования процессов горения фосфоорганическими соединениями. — Новосибирск : Институт химической кинетики и горения СО РАН, 2023. — С. 235.*
48. *Santosh K. D., Singh A. V. Inhibition of Hydrogen–Oxygen/Air Gaseous Detonations Using CF₃I, H₂O, and CO₂ // Fire Safety Journal. — 2021. — Т. 124. — С. 103405.*
49. *Das S. K., Joshi G. N., Kulkarni P. S. Comparative Effectiveness of C₃-Hydrocarbons and Their Mixtures on Suppression of Hydrogen-Air Explosions // International Journal of Hydrogen Energy. — 2024. — Т. 69. — С. 905—917.*
50. *Азатян В. В. Цепные реакции в процессах горения, взрыва и детонации газов. Химические методы управления. — Москва : Издательство РАН, 2020.*
51. *Nicholls J. A., Dabora E. K., Gealer R. L. Studies in Connection with Stabilized Gaseous Detonation Waves // Proceedings of the 7th Symposium (International) on Combustion. — Pittsburgh, PA : The Combustion Institute, 1959. — С. 766—772.*
52. *Dunlap R., Brehm R. L., Nicholls J. A. A Preliminary Study of the Application of Steady-State Detonative Combustion to a Reaction Engine // Jet Propulsion. — 1958. — Т. 28, № 7. — С. 451—456.*

53. *Gross R. A.* Research on Supersonic Combustion // ARS Journal. — 1959. — Т. 29, № 1. — С. 63—71.
54. *Gross R. A., Chinitz W.* A Study of Supersonic Combustion // Journal of the Aerospace Sciences. — 1960. — Т. 27, № 7. — С. 517—524.
55. *Солоухин Р. И.* Пульсирующее горение газа за ударной волной в сверхзвуковом потоке // Прикладная механика и техническая физика. — 1961. — № 5. — С. 57—60.
56. *Bazhenova T. V., Soloukhin R. I.* Gas Ignition Behind the Shock Wave // Proceedings of the 7th Symposium (International) on Combustion. — London : The Combustion Institute, 1958. — С. 866—875.
57. *Быковский Ф. А., Ждан С. А.* Непрерывная спиновая детонация. — Новосибирск : Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 2013.
58. *Быковский Ф. А.* и др. Влияние геометрии камеры сгорания на режимы непрерывной детонации смеси керосин – нагретый воздух // Физика горения и взрыва. — 2025. — Т. 61, № 4. — С. 79—94.
59. *Быковский Ф. А., Ждан С. А., Ведерников Е. Ф.* Непрерывная спиновая детонация безуглеродной смеси аммиак – воздух с добавкой водорода // Физика горения и взрыва. — 2025. — Т. 61, № 1. — С. 152—155.
60. *Самсонов А. Н., Быковский Ф. А., Ведерников Е. Ф.* Исследование непрерывной спиновой детонации бедных водородовоздушных смесей в кольцевой цилиндрической камере сгорания // Физика горения и взрыва. — 2025. — Т. 61, № 4. — С. 138—154.
61. *Быковский Ф. А., Ждан С. А., Ведерников Е. Ф.* Непрерывная многофронтная детонация водотопливной эмульсии с горячим воздухом в кольцевой камере диаметром 503 мм // Физика горения и взрыва. — 2024. — Т. 60, № 3. — С. 117—128.
62. *Быковский Ф. А., Ждан С. А., Ведерников Е. Ф.* Детонационное сжигание смеси керосин – воздух в вихревой радиальной камере с изменением геометрии на входе и выходе // Физика горения и взрыва. — 2024. — Т. 60, № 2. — С. 56—69.

63. Быковский Ф. А., Ждан С. А., Ведерников Е. Ф. Параметры непрерывной многофронтowej детонации смеси метана с нагретым воздухом в кольцевой цилиндрической камере // Физика горения и взрыва. — 2022. — Т. 58, № 2. — С. 28—37.
64. Bykovskii F. A., Zhdan S. A., Vedernikov E. F. Continuous Spin Detonations // Journal of Propulsion and Power. — 2006. — Т. 22, № 6. — С. 1204—1216.
65. Быковский Ф. А., Митрофанов В. В., Ведерников Е. Ф. Непрерывное детонационное сжигание топливно-воздушных смесей // Физика горения и взрыва. — 1997. — Т. 33, № 3. — С. 120—131.
66. Быковский Ф. А., Митрофанов В. В. Детонационное сжигание газовой смеси в цилиндрической камере // Физика горения и взрыва. — 1980. — Т. 16, № 5. — С. 107—117.
67. Frolov S. M. и др. Continuous Detonation Combustor Operating on a Methane–Oxygen Mixture: Test Fires, Thrust Performance, and Thermal State // Aerospace. — 2026. — Т. 13, № 1. — С. 30.
68. Фролов С. М. и др. Непрерывно-детонационное горение водорода: результаты испытаний в аэродинамической трубе // Физика горения и взрыва. — 2018. — Т. 54, № 3. — С. 116—123.
69. Фролов С. М. и др. Ракетный двигатель с непрерывной плёночной детонацией жидкого горючего // Доклады Академии наук. — 2018. — Т. 481, № 2. — С. 1—5.
70. Фролов С. М. и др. Непрерывно-детонационная форсажная камера сгорания // Горение и взрыв. — 2019. — Т. 12, № 4. — С. 88—94.
71. Frolov S. M. и др. Rocket Engine with Continuously Rotating Liquid-Film Detonation. Pulsed Detonation Hydroramjet // Advances in Pulsed and Continuous Detonations / под ред. S. M. Frolov. — Moscow : Torus Press, 2019. — С. 372—396.
72. Иванов В. С. и др. Прямоточный воздушно-реактивный двигатель с непрерывно-детонационным горением водорода: формирование облика с помощью многомерного численного моделирования и огневые испытания // Горение и взрыв. — 2020. — Т. 13, № 1. — С. 66—83.

73. *Шамишин И. О.* и др. Начальная стадия рабочего процесса в непрерывно-детонационном двигателе // Горение и взрыв. — 2022. — Т. 15, № 4. — С. 67—78.
74. *Фролов С. М.* Детонационные двигатели // Ракетно-космические двигательные установки: сборник материалов всероссийской научно-технической конференции / под ред. Я. Д. А. — Москва : МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2023. — С. 28—29.
75. *Иванов В. С.* и др. Измерение давления в непрерывно-детонационных двигателях удаленными датчиками // Переходные режимы горения и детонация / под ред. С. М. Фролов. — Москва : Торус Пресс, 2024. — С. 90—94.
76. *Фролов С. М.* и др. Огневые испытания непрерывно-детонационной камеры сгорания на топливной паре «метан–кислород» // Горение и взрыв. — 2025. — Т. 18, № 2. — С. 41—54.
77. *Быковский Ф. А., Ждан С. А., Ведерников Е. Ф.* Непрерывная многофронтная детонация смесей керосина с нагретым в форкамере воздухом // Физика горения и взрыва. — 2023. — Т. 59, № 5. — С. 103—115.
78. *Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В.* Исследование вращающихся волн детонации в кольцевом зазоре // Избранные вопросы математики и механики. Сборник статей к 70-летию академика Валерия Васильевича Козлова. Т. 310. — Москва : Математический институт им. В. А. Стеклова РАН, 2020. — С. 199—216. — (Труды МИАН).
79. *Levin V. A., Manuilovich I. S., Markov V. V.* Multiheaded Rotating Detonation in an Annular Gap Under Variable Stagnation Pressure // Combustion, Explosion, and Shock Waves. — 2025. — Т. 61. — С. 410—420.
80. *Levin V. A., Manuylovich I. S., Markov V. V.* Multiheaded Rotating Detonation in an Annular Gap // Doklady Physics. — 2022. — Т. 67. — С. 23—26.

81. *Leer B. van.* Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. II. Monotonicity and Conservation Combined in a Second-Order Scheme // Journal of Computational Physics. — 1979. — Т. 32. — С. 101—136.
82. *Liou M.-S.* A Sequel to AUSM: AUSM+ // Journal of Computational Physics. — 1996. — Т. 129, № 2. — С. 364—382.
83. *Новиков Е. А.* L-устойчивый (4,2)-метод четвертого порядка для решения жёстких задач // Вестник Самарского государственного университета. Естественная серия. — 2011. — Т. 8, № 89. — С. 59—68.
84. *Новиков Е. А., Новиков А. Е.* Алгоритм интегрирования с применением L-устойчивого метода четвертого порядка // Университетский научный журнал. — 2015. — № 15. — С. 69—79.
85. *Dorofeev S. B.* Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Nuclear Safety. — 2000. — URL: <http://www.nea.fr> ; Appendix D in *Nuclear Safety: State-of-the-Art Report by a Group of Experts*, NEA/CSNI/R(2000)7, August 2000, OECD NEA.
86. *Abel F. A.* Contributions to the History of Explosive Agents // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. — 1869. — Т. 159. — С. 489—516.
87. *Abel F. A.* Contributions to the History of Explosive Agents –Second Memoir // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. — 1874. — Т. 164. — С. 337—395.
88. *Mallard E., Chatelier H. L.* Recherches expérimentales sur la combustion des mélanges gazeux explosifs // Comptes Rendus de l'Académie des Sciences. — 1881. — Т. 93. — С. 145—148.
89. *Berthelot M., Vieille P.* Sur la propagation des phénomènes explosifs dans les gaz // Comptes Rendus de l'Académie des Sciences. — 1881. — Т. 93. — С. 18—21.
90. *Michelson V. A.* On the Normal Velocity of Flame Propagation in Explosive Gas Mixtures // Uchenye Zapiski Moskovskogo Universiteta, Fiziko-Matematicheskoe Otdelenie. — 1893. — Т. 10. — С. 1—92.
91. *Chapman D. L.* On the Rate of Explosion in Gases // Philosophical Magazine. — 1899. — Т. 47. — С. 90—104.

92. *Jouguet E.* Sur la propagation des réactions chimiques dans les gaz // Journal de Mathématiques Pures et Appliquées. — 1905. — Т. 1. — С. 347—425.
93. *Rankine W. J. M.* On the Thermodynamic Theory of Waves of Finite Longitudinal Disturbance // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. — 1870. — Т. 160. — С. 277—288.
94. *Hugoniot P. H.* Sur la propagation du mouvement dans les corps et spécialement dans les gaz parfaits // Journal de l'École Polytechnique. — 1887. — Т. 57. — С. 3—98.
95. *Crussard J.* On detonation phenomena // Comptes Rendus de l'Académie des Sciences. — 1907. — Т. 144. — С. 417—420.
96. *Lee J. H. S.* The Detonation Phenomenon. — Cambridge : Cambridge University Press, 2008. — С. 402.
97. *Davis W., Fauquignon C.* Classical Theory of Detonation // Journal de Physique IV Proceedings. — 1995. — Т. 5, № C4. — С. C4-3—C4-21.
98. *Зверев И. Н., Смирнов Н. Н.* Газодинамика горения. — Москва : Московский государственный университет, 1989. — С. 307.
99. *Krehl P. O. K.* History of Shock Waves, Explosions and Impact. — Berlin, Heidelberg : Springer, 2009. — С. 1332.
100. *Зельдович Я. Б.* К теории распространения детонации в газообразных системах // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1940. — Т. 10, № 5. — С. 542—568.
101. *Зельдович Я. Б., Ратнер С. Б.* Расчет скорости детонации в газах // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1941. — Т. 11. — С. 170—183.
102. *Зельдович Я. Б.* О распределении давления и скорости в продуктах детонационного взрыва, в частности при сферическом распространении детонационной волны // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1942. — Т. 12, № 9. — С. 389—406.
103. *Neumann J. von.* Theory of Detonation Waves : тех. отч. / National Defense Research Committee, OSRD. — 1942. — OSRD—549.

104. *Döring W.* Über den Detonationsvorgang in Gasen // *Annalen der Physik.* — 1943. — Т. 435, № 6/7. — С. 421—436.
105. *Гриб А. А.* О распространении плоской ударной волны при обыкновенном взрыве у твердой стенки // *Прикладная математика и механика.* — 1944. — Т. 8, № 3. — С. 160.
106. *Erpenbeck J. J.* Stability of Steady-State Equilibrium Detonations // *Physics of Fluids.* — 1962. — Т. 5, № 5. — С. 604—614.
107. *Erpenbeck J. J.* Stability of Idealized One-Reaction Detonations // *Physics of Fluids.* — 1964. — Т. 7, № 5. — С. 684—696.
108. *Fickett W., Wood W. W.* Flow Calculations for Pulsating One-Dimensional Detonations // *Physics of Fluids.* — 1966. — Т. 9, № 5. — С. 903—916.
109. *Левин В. А., Коробейников В. П.* Сильный взрыв в горючей смеси газов // *Известия Академии наук СССР. Механика жидкости и газа.* — 1969. — № 6. — С. 48—51.
110. *Бишимов Е.* и др. Одномерные нестационарные течения горючей смеси газов с учетом конечной скорости химических реакций // *Известия Академии наук СССР. Механика жидкости и газа.* — 1968. — № 6. — С. 7—19.
111. *Ларин О. Б., Левин В. А.* Исследование ослабления волны детонации с двухфронтной структурой // *Известия Академии наук СССР. Механика жидкости и газа.* — 1971. — № 3. — С. 59—65.
112. *Левин В. А., Марков В. В.* Возникновение детонации при концентрированном подводе энергии // *Физика горения и взрыва.* — 1975. — № 4. — С. 623—633.
113. *Войцеховский Б. В., Митрофанов В. В., Топчий М. Е.* Структура фронта детонации в газах. — Новосибирск : Издательство СО АН СССР, 1963.
114. *Седов Л. И., Коробейников В. П., Марков В. В.* Теория распространения взрывных волн // *Теоретическая и математическая физика: Сборник обзорных статей. К 50-летию института.* Т. 175. — 1986. — С. 178—216. — (Труды МИАН СССР).

115. *Urtiew P. A., Oppenheim A. K.* Experimental Observations of Transition to Detonation in an Explosive Gas // Proceedings of the Royal Society of London A. — 1966. — Т. 295. — С. 13—28.
116. *Lee J. H. S.* Detonation Waves // Annual Review of Fluid Mechanics. — 1984. — Т. 16. — С. 311—336.
117. *Eckett C. A.* Numerical and Analytical Studies of the Dynamics of Gaseous Detonations : дис. ... канд. / Eckett C. A. — Pasadena, California : California Institute of Technology, 2000.
118. *Austin J. M.* The Role of Instability in Gaseous Detonation : дис. ... канд. / Austin Joanna M. — Pasadena, California : California Institute of Technology, 2003.
119. *Moen I. O.* и др. Detonation Length Scales for Fuel-Air Explosives // Progress in Astronautics and Aeronautics. Т. 94. — 1984. — С. 55—79.
120. *DuPre G.* и др. Propagation of Detonation Waves in an Acoustic Walled Tube // Progress in Astronautics and Aeronautics. Т. 114. — 1988. — С. 248—263.
121. *Gamezo V. N., Khokhlov A. M., Oran E. S.* Secondary Detonation Cells in Systems with High Activation Energy // Proceedings of the 17th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems. — Heidelberg, Germany, 1999.
122. *Левин В. А.* и др. Нелинейные волновые процессы при инициировании и распространении газовой детонации // Нелинейная динамика: Сборник статей. Т. 251. — Москва : Наука, 2005. — С. 200—214. — (Труды МИАН).
123. *Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В.* Новые эффекты слоистой газовой детонации // Доклады Российской Академии наук. — 2010. — Т. 430, № 2. — С. 185—188.
124. *Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В.* Особенности галопирующей детонации в сверхзвуковом потоке неоднородной горючей смеси // Известия РАН. Механика жидкости и газа. — 2010. — № 5. — С. 167—175.

125. Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В. Возбуждение и срыв детонации в газах // Инженерно-физический журнал. — 2010. — Т. 83, № 6. — С. 1174—1201.
126. Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В. Ячеистая структура расходящейся цилиндрической волны детонации // Доклады Российской Академии наук. — 2011. — Т. 439, № 1. — С. 48—50.
127. Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В. Формирование спино-вой детонации в каналах круглого сечения // Доклады Российской Академии наук. — 2015. — Т. 460, № 6. — С. 656—659.
128. Марков В. В., Кузовлев Д. И. Деформация двумерной следовой картины течения детонации при “непрерывном” изменении ширины плоского канала // Доклады Российской Академии наук. Физика, технические науки. — 2023. — Т. 511, № 1. — С. 50—54.
129. Yakupov E. O., Gubernov V. V., Polezhaev A. A. Modeling of Wave Patterns at the Combustion Front // Izvestiya VUZ. Applied Nonlinear Dynamics. — 2021. — Т. 29, № 4. — С. 538—548.
130. Yakupov E. O., Gubernov V. V., Polezhaev A. A. Formation of Spiral Structures in Rich-Hydrogen Air Flames at Elevated Pressures // International Journal of Hydrogen Energy. — 2024. — Т. 49. — С. 784—795.
131. Moroshkina A. и др. The Performance of Reaction Mechanism in Prediction of the Characteristics of the Diffusive-Thermal Oscillatory Instability of Methane–Hydrogen–Air Burner-Stabilized Flames // Acta Astronautica. — 2024. — Т. 215. — С. 496—504.
132. Bhattacharjee R. R. Experimental Investigation of Detonation Re-Initiation Mechanisms Following a Mach Reflection of a Quenched Detonation : дис. ... маг. / Bhattacharjee R. R. — University of Ottawa, 2013.
133. Monwar M. и др. // Journal of Thermal Science. — 2007. — Т. 16, № 3. — С. 283—288.
134. Dove J. E., Scroggie B. J., Semerjian H. // Acta Astronautica. — 1974. — Т. 1, № 3. — С. 345—359.

135. *Chao J., Ng H. D., Lee J. H. S.* // Proceedings of the Combustion Institute. — 2009. — T. 32, № 2. — C. 2349—2354.
136. *International Energy Agency.* Net Zero by 2050: A Roadmap for the Global Energy Sector. — IEA Publications, 2021.
137. *Sánchez A. L., Williams F. A.* Recent Advances in Understanding of Flammability Characteristics of Hydrogen // Progress in Energy and Combustion Science. — 2014. — T. 41. — C. 1—55.
138. *Yakovenko I., Melnikova K., Kiverin A.* Ultra-Lean Hydrogen-Air Flames Initiated by a Hot Surface // Acta Astronautica. — 2024. — T. 225. — C. 218—226.
139. *Gordon S., Schmidt K. H., Honekamp J. R.* An Analysis of the Hydrogen Bubble Concerns in the Three-Mile Island Unit-2 Reactor Vessel // Radiation Physics and Chemistry. — 1983. — T. 21, № 3. — C. 247—258.
140. *Suppes G. J., Storvick T. S.* Nuclear Power Plant Design // Sustainable Nuclear Power. — Academic Press, 2007. — C. 319—351.
141. *Yanez J., Kuznetsov M., Souto-Iglesias A.* An Analysis of the Hydrogen Explosion in the Fukushima-Daiichi Accident // International Journal of Hydrogen Energy. — 2015. — T. 40, № 25. — C. 8261—8280.
142. *Ciccarelli G., Dorofeev S.* Flame Acceleration and Transition to Detonation in Ducts // Progress in Energy and Combustion Science. — 2008. — T. 34, № 4. — C. 499—550.
143. *Kiverin A. и др.* Three-Dimensional Structure of Freely-Propagating Flame Prior to Deflagration-to-Detonation Transition // Acta Astronautica. — 2023. — T. 204. — C. 686—691.
144. *Shang S., Zhang J., Zhang J. и др.* Study on the Effect of Explosion Suppression Equipment on Hydrogen Explosions // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. — 2023. — T. 83. — C. 105046.
145. *Cao X., Wang Z., Wang Z. и др.* Experimental Research on the Flame Resistance Characteristics of Wire Mesh for Syngas Explosion // Process Safety and Environmental Protection. — 2023. — T. 175. — C. 34—47.

146. *Smirnov N. N., Azatyan V. V., Nikitin V. F. и др.* Control of Detonation in Hydrogen-Air Mixtures // International Journal of Hydrogen Energy. — 2024. — Т. 49. — С. 1315—1324.
147. *Smirnov N. N., Nikitin V. F.* Effect of Channel Geometry and Mixture Temperature on Detonation-to-Deflagration Transition in Gases // Combustion, Explosion, and Shock Waves. — 2004. — Т. 40. — С. 186—199.
148. *Smirnov N. N.* Combustion and Detonation in Multi-Phase Media: Initiation of Detonation in Dispersed-Film Systems Behind a Shock Wave // International Journal of Heat and Mass Transfer. — 1988. — Т. 31, № 4. — С. 719—723.
149. *Lucas M., Hisken H., Skjold T. и др.* CFD Modelling of Hydrogen and Hydrogen-Methane Explosions: Analysis of Varying Concentration and Reduced Oxygen Atmospheres // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. — 2023. — Т. 83. — С. 105012.
150. *Thomas J. K., Eastwood C., Goodrich M.* Are Unconfined Hydrogen Vapor Cloud Explosions Credible? // Process Safety Progress. — 2015. — Т. 34. — С. 36—43.
151. *Norton D. G., Vlachos D. G.* Combustion Characteristics and Flame Stability at the Microscale: A CFD Study of Premixed Methane/Air Mixtures // Chemical Engineering Science. — 2003. — Т. 58. — С. 4871—4882.
152. *Kiverin A. и др.* Ignition and Non-Stationary Combustion of the Foamed Heptane-in-Water Emulsion: Experimental and Numerical Analysis // Fuel. — 2022. — Т. 320. — С. 123824.
153. *Kiverin A., Yakovenko I.* Unsteady Combustion of the Heptane-in-Water Emulsion Foamed with Hydrogen-Oxygen Mixture // Applied Sciences. — 2023. — Т. 13, № 8. — С. 4829.
154. *Smirnov N. N. и др.* Safety of Using Hydrogen: Suppression of Detonation in Hydrogen-Air Mixtures // Acta Astronautica. — 2024. — Т. 224. — С. 69—81.

155. *Smirnov N. N., Tyurnikov M. V.* A Study of Deflagration and Detonation in Multiphase Hydrocarbon-Air Mixtures // Combustion and Flame. — 1994. — Т. 96, № 1/2. — С. 130—140.
156. *Войцеховский Б. В.* Стационарная детонация // Доклады Академии наук СССР. — 1959. — Т. 129, № 6. — С. 1254—1256.
157. *Войцеховский Б. В.* Стационарная спиновая детонация // Прикладная математика и техническая физика. — 1960. — № 3. — С. 157—164.
158. *Щелкин К. И.* Быстрое горение и спиновая детонация газов. — Москва : Военное издательство Министерства обороны СССР, 1949.
159. *Михайлов В. В., Топчин М. Е.* К исследованиям непрерывной детонации в кольцевом канале // Физика горения и взрыва. — 1965. — Т. 1, № 4. — С. 20—23.
160. *Wolański P.* Detonation Engines // Journal of KONES. — 2011. — Т. 18, № 3. — С. 515—521.
161. *Wolański P.* Detonative Propulsion // Proceedings of the Combustion Institute. — 2013. — Т. 34, № 1. — С. 125—158.
162. *Xie Q.* и др. Review on the Rotating Detonation Engine and Typical Problems // Transactions on Aerospace Research. — 2020. — Т. 2020, № 4. — С. 107—163.
163. *Быковский Ф. А., Клопотов И. Д., Митрофанов В. В.* Спиновая детонация газов в цилиндрической камере // Доклады Академии наук СССР. — 1975. — Т. 224, № 5. — С. 1038—1041.
164. *Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В.* Численное моделирование спиновой детонации в каналах круглого сечения // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2016. — Т. 56, № 6. — С. 203—218.
165. *Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В.* Вращающаяся волна детонации в кольцевом зазоре // Труды МИАН. Т. 300. — Москва : МАИК “Наука/Интерпериодика”, 2018. — С. 135—145.

166. *Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В.* Многоголовая вращающаяся детонация в кольцевом зазоре // Доклады Российской Академии наук. Физика, технические науки. — 2022. — Т. 502, № 1. — С. 45—49.
167. *Чванов В. К.* и др. Трехмерный расчет газодинамических параметров продуктов сгорания в кольцевой камере ЖРД с вращающейся детонацией // Труды НПО “Энергия” им. академика В. П. Глушко. — 2015. — № 32. — С. 23—35.
168. *Roy G. D.* и др. Pulse Detonation Propulsion: Challenges, Current Status, and Future Perspective // Progress in Energy and Combustion Science. — 2004. — Т. 30. — С. 545—672.
169. *Anand V., Gutmark E.* Rotating Detonation Combustors and Their Similarities to Rocket Instabilities // Progress in Energy and Combustion Science. — 2019. — Т. 73. — С. 182—234.
170. *Wolański P., Kawalec M., Benkiewicz K.* Detonative Propulsion // Hydrogen for Future Thermal Engines / под ред. Е. А. Tingas. — Cham : Springer, 2023. — С. —. — (Green Energy and Technology).
171. *Kawasaki A.* и др. Critical Condition of Inner Cylinder Radius for Sustaining Rotating Detonation Waves in Rotating Detonation Engine Thruster // Proceedings of the Combustion Institute. — 2019. — Т. 37. — С. 3461—3469.
172. *Tang X.-M., Wang J.-P., Shao Y.-T.* Three-Dimensional Numerical Investigations of the Rotating Detonation Engine with a Hollow Combustor // Combustion and Flame. — 2015. — Т. 162. — С. 997—1008.
173. *Zhang Y.* и др. Experimental Research on the Performance of Hollow and Annular Rotating Detonation Engines with Nozzles // Applied Thermal Engineering. — 2023. — Т. 218. — С. 119339.
174. *Yokoo R.* и др. Propulsion Performance of Cylindrical Rotating Detonation Engine // AIAA Journal. — 2020. — Т. 58. — С. 5107—5116.
175. *Yokoo R.* и др. Experimental Study of Internal Flow Structures in Cylindrical Rotating Detonation Engines // Proceedings of the Combustion Institute. — 2021. — С. 3759—3768.

176. *Bykovskii F. A.* Thermal Fluxes in Combustion Chamber Walls in the Detonation and Turbulent Combustion Modes // Combustion, Explosion, and Shock Waves. — 1991. — T. 27. — С. 66—71.
177. *Lu S. и др.* Numerical Study of Phase Change Heat Transfer in Rotating Detonation Combustion Chamber with Transpiration Cooling Using Liquid Coolant // Applied Thermal Engineering. — 2025. — Т. 265. — С. 125571.
178. *Bykovskii F. A., Zhdan S. A., Vedernikov E. F.* Reactive Thrust Generated by Continuous Detonation in the Air Ejection Mode // Combustion, Explosion, and Shock Waves. — 2013. — Т. 49, № 2. — С. 188—195.
179. *Humble J. A.* Quasi One-Dimensional Modeling of Rotational Detonation Engines // AIAA Aerospace Sciences Meeting. — 2018.
180. *Johnson K. B. и др.* Analysis of Quasi-Steady, Transitional, and Short Timescale Galloping within Rotating Detonation Engines // AIAA SciTech 2023 Forum. — 2023.
181. *Nakata K. и др.* Experimental Investigation of Inner Flow of a Throatless Diverging Rotating Detonation Engine // Proceedings of the Combustion Institute. — 2023. — Т. 39. — С. 3073—3082.
182. *Niyasdeen M. и др.* Quasi-Steady State Simulation of Rotating Detonation Engine // International Journal of Aeronautical and Space Sciences. — 2015. — Т. 16. — С. 548—559.
183. *Zhou R., Wang J.-P.* Numerical Investigation of Flow Particle Paths and Thermodynamic Performance of Continuously Rotating Detonation Engines // Combustion and Flame. — 2012. — Т. 159. — С. 3632—3645.
184. *Goto K. и др.* Propulsive Performance and Heating Environment of Rotating Detonation Engine with Various Nozzles // Journal of Propulsion and Power. — 2019. — Т. 35. — С. 213—223.
185. *Talukdar S. и др.* Flow and Performance Characterization of Rotating Detonation Combustor Integrated with Various Convergent Nozzles // AIAA Journal. — 2024. — Т. 62. — С. 2388—2400.

186. *Stewart D. S., Kasimov A. R.* State of Detonation Stability Theory and Its Application to Propulsion // Journal of Propulsion and Power. — 2006. — T. 22. — C. 1230—1244.
187. *Tunik Y. V., Assad M. S.* Detailed Analysis of the Energy Efficiency of an Incomplete Thermodynamic Cycle with Detonation Combustion // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. — 2025. — T. 98, № 4. — C. 920—935.
188. *Assad M. S., Tunik Y. V.* Restrictions on the Thermodynamic Efficiency of the Detonation Cycle // Applied Thermal Engineering. — 2023. — T. 219, Part B. — C. 119548.
189. *Assad M. S., Chernuho I. A., Tunik Y. V.* Synergistic Effect of Physicochemical and Geometric Techniques for Initiating Detonation in a Small-Size Pulse Detonation Engine // Fuel. — 2024. — T. 373. — C. 132227.
190. *Betelin V. B., Nikitin V. F., Mikhilchenko E. V.* 3D Numerical Modeling of a Cylindrical RDE with an Inner Body Extending out of the Nozzle // Acta Astronautica. — 2020. — T. 176. — C. 628—646.
191. *Smirnov N. N. и др.* Three-Dimensional Modeling of Rotating Detonation in a Ramjet Engine // Acta Astronautica. — 2019. — T. 163. — C. 168—176.
192. *Smirnov N. N. и др.* Rotating Detonation in a Ramjet Engine: Three-Dimensional Modeling // Aerospace Science and Technology. — 2018. — T. 81. — C. 213—224.
193. CHEMKIN: A Software Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical and Plasma Kinetics / Reaction Design. — 09.2000. — CHE-036-1, Chemkin Collection Release 3.6.
194. *Burcat A.* Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion : тех. отч. / Technion — Israel Institute of Technology. — 01.2001. — TEA867.
195. *Marinov N. M. и др.* An Experimental and Kinetic Calculation of the Promotion Effect of Hydrocarbons on the NO–NO₂ Conversion in a Flow Reactor // Proceedings of the Combustion Institute. T. 27. — 1998. — C. 389—396. — UCRL-JC-129372, UCRL-WEB-204236.

196. *Nikitin V. F., Mikhalechenko E. V.* Safety of a Rotating Detonation Engine Fed by Acetylene–Oxygen Mixture: Launching Stage // *Acta Astronautica*. — 2022. — T. 194. — C. 496–503.
197. *Hong Z.* и др. A Shock Tube Study of $\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$ and $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightarrow 2\text{OH} + \text{M}$ Using Laser Absorption of H_2O and OH : Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition Space // *Journal of Physical Chemistry A*. — 2010. — T. 114, № 18. — C. 5718–5727.
198. *Tereza A. M., Medvedev S. P., Smirnov V. N.* Experimental Study and Numerical Simulation of Chemiluminescence Emission during the Self-Ignition of Hydrocarbon Fuels // *Acta Astronautica*. — 2019. — T. 163. — C. 18–24.
199. *Frenklach M.* и др. GRI-Mech — An Optimized Detailed Chemical Reaction Mechanism for Methane Combustion : тех. отч. / Gas Research Institute. — 11.1995. — GRI–95/0058.
200. *Maas U., Pope S. B.* Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition Space // *Combustion and Flame*. — 1992. — T. 88. — C. 239–264.
201. *Li J.* и др. An Updated Comprehensive Kinetic Model of Hydrogen Combustion // *International Journal of Chemical Kinetics*. — 2004. — T. 36. — C. 566–575.
202. *Williams F. A.* Short Chemical Mechanisms for Detonations and Deflagrations // Spring Meeting of the Western States Section of the Combustion Institute. — 2004. — Paper 04-S-1.
203. *Browne S., Ziegler J., Shepherd J. E.* Numerical Solution Methods for Shock and Detonation Jump Conditions : тех. отч. / GALCIT, California Institute of Technology. — 2008. — FM2006.006.
204. *Gordon S., McBride B. J.* Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications I: Analysis : тех. отч. / NASA. — 10.1994. — RP–1311.
205. *Kee R. J., Miller J. A., Jefferson T. H.* CHEMKIN: A General-Purpose, Problem-Independent, Transportable Fortran Chemical Kinetics Code Package : тех. отч. / Sandia National Laboratories. — 1980. — SAND80–8003.

206. *Wilke C. R.* A Viscosity Equation for Gas Mixtures // Journal of Chemical Physics. — 1950. — Т. 18, № 4. — С. 517—519.
207. *Гиршфельдер Д., Кертисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. — Москва : Издательство иностранной литературы, 1961. — С. 933.
208. *Рид Р., Праусниц Д., Шервуд Т.* Свойства газов и жидкостей: справочное пособие. — Ленинград : Химия, 1982. — С. 592.
209. *Neufeld P. D., Janzen A. R., Aziz R. A.* Empirical Equations to Calculate 16 of the Transport Collision Integrals for the Lennard–Jones (12-6) Potential // Journal of Chemical Physics. — 1972. — Т. 57. — С. 1100—1102.
210. *Mason E. A., Saxena S. C.* Approximate Formula for the Thermal Conductivity of Gas Mixtures // Physics of Fluids. — 1958. — Т. 1. — С. 361—369.
211. *Бретшнайдер С.* Свойства газов и жидкостей. — Москва; Ленинград : Химия, 1966. — С. 536.
212. *Smirnov N. N.* и др. Onset of Detonation in Hydrogen–Air Mixtures Due to Shock Wave Reflection inside a Combustion Chamber // Acta Astronautica. — 2018. — Т. 149. — С. 77—92.
213. *Denisov Y. N., Troshin Y. K.* On the Mechanism of Detonative Combustion // Proceedings of the 8th Symposium (International) on Combustion. Т. 8. — 1961. — С. 600—610.
214. *Azatyan V. V.* и др. The Role of Heterogeneous Chain Reaction Termination in Flame Propagation // Kinetics and Catalysis. — 2022. — Т. 63, № 4. — С. 484—490.
215. *Wilcox D. C.* Turbulence Modeling for CFD. — La Cañada : DCW Industries, 1993.
216. *Lauder B. E., Spalding D. B.* The Numerical Computation of Turbulent Flows // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 1974. — Т. 3. — С. 269—289.

217. *Bredberg J.* On the Wall Boundary Condition for Turbulence Models :
тех. отч. / Department of Thermo ; Fluid Dynamics, Chalmers
University of Technology. — Göteborg, Sweden, 2000. — Internal Report
00/4.
218. *Kader B. A.* Temperature and Concentration Profiles in Fully Turbulent
Boundary Layers // International Journal of Heat and Mass Transfer. —
1981. — Т. 24. — С. 1541—1544.
219. *Popovac M., Hanjalić K.* Compound Wall Treatment for RANS
Computation of Complex Turbulent Flows and Heat Transfer // Flow,
Turbulence and Combustion. — 2007. — Т. 78. — С. 177—202.
220. *Vlasov P. A., Smirnov V. N., Tereza A. M.* Reactions of Initiation of
the Autoignition of H₂–O₂ Mixtures in Shock Waves // Russian Journal
of Physical Chemistry B. — 2016. — Т. 10. — С. 456—468.
221. *Liu B., He G., Qin F.* Simulation of Supersonic Ethylene–Hydrogen
and Air Auto-Ignition Flame Using Skeletal Mechanism // Acta
Astronautica. — 2018. — Т. 152. — С. 521—533.
222. *Быковский Ф. А., Ждан С. А., Ведерников Е. Ф.* Непрерывная
детонация в режиме автоколебательной подачи окислителя 1. Окис-
литель – кислород // Физика горения и взрыва. — 2010. — Т. 46,
№ 3. — С. 116—124.

Приложение А

А.1 Численная схема

Систему исходных уравнений можно компактно записать в виде баланса консервативных переменных U_q , регулируемого конвективным потоком $\Phi_q \mathbf{u}$, компрессионным потоком P_q , потоком переноса Ψ_q , и источником Q_q , где q – индекс уравнения:

$$\frac{\partial U_q}{\partial t} + \nabla \cdot (\Phi_q \mathbf{u} + \Psi_q + \mathbf{P}_q) = Q_q \quad (\text{A.1})$$

Для дискретизации системы применяется метод конечных объемов: узловой точкой является центр элемента; уравнения интегрируются по объему элемента, и применяется теорема Гаусса – Остроградского.

Схема решения уравнений (A.1), к которой приводит метод конечных объемов в сочетании с дискретизацией по времени первого порядка на сетке из одинаковых элементов в форме прямоугольных параллелепипедов, выглядит следующим образом:

$$(U_q)_n^+ = (U_q)_n + \Delta t \cdot (Q_q)_n + \sum_{\alpha=0}^2 \lambda_{\alpha} \left((\Phi_q u_{\alpha} + \Psi_{q,\alpha} + P_{q,\alpha})_{n,\alpha,0} - (\Phi_q u_{\alpha} + \Psi_{q,\alpha} + P_{q,\alpha})_{n,\alpha,1} \right) \quad (\text{A.2})$$

Здесь $F_{n,\alpha,0}$ и $F_{n,\alpha,1}$ – интерполяция значения некоторой переменной F на грань, разделяющую ячейку n и соседнюю ячейку в координатном направлении α , индекс α проходит вниз и вверх по координате, соответственно. Потоки должны быть рассчитаны (интерполированы) на этой грани так, чтобы схема обладала достаточной устойчивостью и одновременно хорошей аппроксимацией. Коэффициенты в уравнении (A.2) равны $\lambda_{\alpha} = \Delta t / h_{\alpha}$, где Δt – шаг по времени.

Метод интерполяции переменных на грань определяет вид схемы; он часто (и здесь в частности) отличается для конвективных и компрессионных потоков. Использование интерполяции каким-либо средним значением

(арифметическим, геометрическим и др.) приводит к неустойчивой схеме; мы будем использовать интерполяцию сверху по потоку второго порядка (кроме, может быть, областей высокого градиента) MUSCL (расшифровывается как Monotonic Upstream-centered Schemes for Conservation Laws, или монотонные схемы для законов сохранения с центрированием вверх по потоку) [81]. Такая интерполяция для конвективных потоков производится сверху по потоку, но для потока давления используется метод AUSMP (Advection Upstream Splitting Method Plus, или метод расщепления вверх по потоку для адвекции, улучшенный) для расчета весов правой и левой интерполяции [82], так как этот поток для дозвуковых течений распространяется как вниз, так и вверх по течению.

A.2 Расчет химических процессов

В этом разделе рассматривается та часть расчета задачи, которая отвечает за химические процессы, определяемые условиями в точке сплошной среды такими, как температура, давление и плотность компонентов газовой смеси. Часть эта связана с общей задачей следующим образом.

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho_k}{\partial t} &= \dot{\omega}_k + f_k \\ f_k &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\rho_k u_j + (\rho D) \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\rho_k}{\rho} \right) \right]\end{aligned}\tag{A.3}$$

где f_k – суммарный поток массы компонента k за счет конвекции и диффузии. При расчетах левая часть (A.3) аппроксимируется как конечная разность между начальным и конечным состоянием парциальной плотности компонента в ячейке, суммарный же поток f_k через поверхность ячейки может аппроксимироваться на каждом из слоев по времени линейной комбинацией соответствующих потоков через грани ячейки (детали этой аппроксимации выходят за рамки настоящего раздела, наибольшую трудность представляет собой в этом случае стабилизация численного расчета, для которой служат противопоточные аппроксимации переменных на границах с целью расчета потоков по этим аппроксимациям). Схема явная по

потокам в том случае, когда f_k рассчитывается по начальному состоянию времени на шаге, неявная – когда используется линейная комбинация начального и конечного состояний. Во многих случаях используется явная двух- или более чем двухшаговая схема ради повышения порядка аппроксимации по времени.

Наибольшую сложность в подобных расчетах все же представляет не f_k , а $\dot{\omega}_k$, несмотря на то, что последний не содержит пространственных производных параметров, являясь алгебраическим выражением от набора плотностей ρ_s компонентов и температуры T . Причина здесь даже не в сложности этих выражений самой по себе, а в их потенциальной сильной нелинейности, из-за которой временная аппроксимация как по начальному состоянию, так и по какой-либо линейной комбинации начального и конечного не будет адекватной, если только шаг по времени не делать чрезвычайно малым. Алгебраически это выражается в том, что

$$\langle \dot{\omega}_k \rangle = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \dot{\omega}_k dt \neq \sigma \dot{\omega}_k(t + \Delta t) + (1 - \sigma) \dot{\omega}_k(t) \quad (\text{A.4})$$

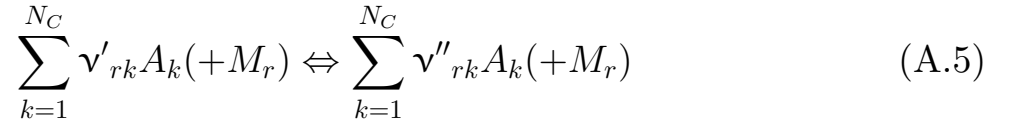
при любом весовом множителе σ , по крайней мере, во многих случаях. Аппроксимация среднего на шаге по времени притока массы компоненты тем самым требует не только знания начального и конечного на шаге, но и промежуточных состояний. Это обычно достигается дроблением шага по времени, но в том случае, когда при этом каждый раз требуется вычислять поток f_k , требующий аппроксимации пространственных производных, то это приведет к необходимости дробить шаг по всей рабочей области даже в том случае, когда проблемы нелинейности $\dot{\omega}_k$ возникают в небольшом числе ячеек. Расчеты показывают, что в таком случае шаг по времени сокращается на несколько порядков по сравнению с газодинамическим, что приводит не только к замедлению всего счета, но и к увеличению накопления ошибки из-за большого количества шагов.

Альтернативой дроблению шага, который подчинялся бы уже не требованиям критериев, задаваемых газовой динамикой (Куранта – Фридрихса – Леви с учетом явлений переноса), а критериев аппроксимации химических процессов, является расчет $\langle \dot{\omega}_k \rangle$ при помощи вспомогательной задачи. Эта задача решалась бы независимо в каждой ячейке рабочей области, что позволяло бы дробить шаг по времени независимо. Во-вторых, решение ее

могло бы учитывать сильную нелинейность системы, применяя неявные или полунеявные методы, позволяющие дробить шаг как можно меньше. В нашем случае выбор пал на метод Новикова, позволяющий делать дробление шага возможно реже, обеспечивающий автоматический контроль этого шага, а также требующий минимум “долгих” операций, таких, как вычисление значений $\dot{\omega}_k$, по сравнению со своими аналогами.

А.3 Вычисление интенсивности производства компонентов

Элементарный механизм состоит из N_R реакций следующего вида:



где под A_k понимается символ компоненты, под M_r – возможное влияние обобщенного третьего тела, ν'_{rk} , ν''_{rk} – матрицы входящих и исходящих стехиометрических коэффициентов. Для элементарных механизмов эти матрицы сильно разреженные, состоят лишь из неотрицательных целых чисел, причем большая часть ненулевых коэффициентов равна 1. Если входящий и исходящий коэффициент оба ненулевые (часто одинаковые), то их разность фактически тоже определяет влияние не изменяемого в реакции тела, записываемого специфически, как одна или несколько компонент. Третье тело может также записываться отдельно как линейная комбинация влияния всех компонент газовой смеси. В обменных реакциях и некоторых других третье тело может отсутствовать: энергетика в этом случае распределяется лишь между участвующими в химическом взаимодействии компоненте.

Закон действующих масс.

Интенсивность реакции r обозначим ω_r (без значка над буквой ω). Через нее выражается по закону действующих масс интенсивность производства масс компонент в реакции $\dot{\omega}_{rk}$ следующим образом:

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_{rk} &= W_k \nu_{rk} \omega_r \\ \nu_{rk} &= \nu''_{rk} - \nu'_{rk} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Здесь ν_{rk} – матрица алгебраических стехиометрических коэффициентов; ее компоненты также целочисленны для элементарного механизма, но имеют любой знак. Интенсивность производства молей компонент в реакции равна интенсивности производства массы, деленной на массу моля. Наконец, все реакции идут одновременно, так что в общем случае интенсивность производства моля компоненты в единице объема в химических взаимодействиях определяется суммой по всем реакциям:

$$\hat{\omega}_{rk} = \sum_{r=1}^{N_R} \nu_{rk} \omega_r \quad (\text{A.7})$$

Заметим, что закон сохранения элементов должен выполняться при любых значениях интенсивности реакций ω_r ; именно эти величины независимы, но не интенсивности производства компонент, которые с ними связаны. Это достигается тем, что матрица алгебраических стехиометрических коэффициентов не может быть произвольной; на нее накладываются ограничения, ответственные за сохранение баланса элементов в каждой реакции:

$$\sum_{k=1}^{N_C} n_{jk} \nu_{rk} = 0, \quad j = 1, \dots, N_E \quad (\text{A.8})$$

Кинетический механизм, не обладающий свойством (A.8), не сбалансирован по элементам. Именно свойство (A.8) позволяет применить закон сохранения элементов к системе химической кинетики.

Интенсивность реакции – общая формула.

Интенсивность реакции в общем случае определяется выражением [194]:

$$\omega_r = f_r(T, M_r) \left[\prod_{k=1}^{N_C} X_k^{\nu'_{rk}} - \frac{\theta_r}{K_r(T)} \prod_{k=1}^{N_C} X_k^{\nu''_{rk}} \right] \quad (\text{A.9})$$

Здесь f_r называется коэффициентом интенсивности прямой реакции; он зависит от температуры и от концентрации «третьего тела», если таковое в реакции присутствует. Под ним понимается линейная комбинация из молярных плотностей не изменяемых в реакции компонент. Эта комбинация в общем случае своя для каждой реакции, хотя встречаются механизмы с едиными коэффициентами для всех реакций.

Величина θ_r равна нулю для необратимой реакции и 1 для обратимой. В большинстве элементарных механизмов все реакции обратимы (кроме реакций дробления крупных молекул на множество мелких в одном акте – обратная реакция в таком случае практически невероятна).

Константа равновесия.

Величина K_r называется константой равновесия; она определяет соотношение между входящими и исходящими компонентами в состоянии химического равновесия для обратимой реакции, и определяется только термодинамикой входящих и исходящих компонент, а именно их энтальпией и энтропией, включающими энтальпии и энтропии формирования. В состоянии химического равновесия, когда равновесные концентрации и температура обозначены нами с черточкой сверху, это соотношение таково:

$$\frac{\prod_{k=1}^{N_C} \bar{X}_k^{\nu''_{rk}}}{\prod_{k=1}^{N_C} \bar{X}_k^{\nu'_{rk}}} = K_r(\bar{T}) \quad (\text{A.10})$$

Константа равновесия рассчитывается на основе стехиометрических коэффициентов реакции и термодинамических свойств вовлеченных компонент следующим образом:

$$\ln K_r(T) = - \sum_{k=1}^{N_C} \nu_{rk} \left(\frac{H_k(T)}{R_G T} - \frac{S_k(T)}{R_G} - 1 \right) + \left(\sum_{k=1}^{N_C} \nu_{rk} \right) \ln \frac{p_B}{R_G T} \quad (\text{A.11})$$

Здесь H_k – молярная энтальпия компонента, включающая энтальпию формирования, S_k – молярная энтропия компонента при базовом давлении p_B , включая энтропию формирования. В скобках в левой части выражения стоит безразмерная энергия Гельмгольца в расчете на моль; за ее отличие от энергии Гиббса отвечает вычитаемая единица. Энергия Гельмгольца в этом выражении требуется нам для того, чтобы равновесие соответствовала условию сохранения плотности и внутренней энергии во вспомогательной задаче. В большинстве случаев в публикациях обратную реакцию рассчитывают на основе энергии Гиббса, это справедливо для условий сохранения энтальпии и давления, но в нашем случае задача ставится так, что равновесие определяется энергией Гельмгольца.

А.4 Коэффициент прямой реакции

Всего рассматривается три варианта вычисления коэффициента прямой реакции. В простейшем случае он зависит лишь от температуры, то есть третье тело в реакции не участвует. Зависимость от температуры аппроксимируется функцией Аррениуса, так что:

$$f_r(T, M_r) = k_r(T) = A_r T^{b_r} \exp\left(-\frac{E_r}{R_G T}\right) = \exp\left(a_r + b_r \ln T - \frac{\theta_r}{T}\right) \quad (\text{A.12})$$

Константы аппроксимации (A.12) обычно прилагаются в базах данных к реакциям кинетического механизма [193].

Простой вариант зависимости коэффициента прямой реакции от третьего тела – прямая пропорциональность ему (под этой величиной понимается в общем случае линейная комбинация из молярных плотностей компонент):

$$\begin{aligned} f_r(T, M_r) &= M_r k_r(T) = M_r A_r T^{b_r} \exp\left(-\frac{E_r}{R_G T}\right) \\ &= M_r \exp\left(a_r + b_r \ln T - \frac{\theta_r}{T}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Наконец, многие (не все) кинетические механизмы содержат сложный вариант зависимости от третьего тела. Из нескольких возможных вариантов таких “выпадающих” реакций в подавляющем большинстве случаев рассматривается модификация зависимости (A.13), изменяющая ее в пределе низкого давления, так что основными коэффициентами Аррениуса остаются те, что соответствуют высокому давлению (в пределе высокого значения M_r , пропорционального давлению в силу уравнения состояния Клапейрона). А именно,

$$\begin{aligned} f_r(T, M_r) &= k_r^{high}(T) \frac{P_r}{1 + P_r} F_r(T, M_r) \\ P_r &= \frac{M_r k_r^{low}(T)}{k_r^{high}(T)} \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Зависимость $k_r^{high}(T)$ аппроксимируется теми же коэффициентами формулы Аррениуса, что и прилагаются к кинетическому механизму в первых двух простых случаях. Зависимость $k_r^{low}(T)$ также аппроксимируется по Аррениусу, но эти коэффициенты прилагаются дополнительно, и только для “выпадающих” реакций:

$$k_r^{low} = A_r^{low} T^{b_r^{low}} \exp\left(-\frac{E_r^{low}}{R_G T}\right) = \exp\left(a_r^{low} + b_r^{low} \ln T - \frac{\theta_r^{low}}{T}\right) \quad (\text{A.15})$$

Зависимость $F_r(T, M_r)$ может быть двух видов (прочие варианты встречаются значительно реже). В простейшем варианте, по Линдеману, полагается

$$F_r(T, M_r) = 1 \quad (\text{A.16})$$

В более распространенном варианте, по Троу, эта функция зависит еще от четырех констант, которые также прилагаются в базе данных к “выпадающей” реакции. Формула расчета выглядит следующим образом [193]:

$$\ln F_r = \frac{\ln F_r^{cent}(T)}{1 + C_r^2} \quad (\text{A.17})$$

$$C_r = \frac{\ln P_r - 0.4 - 0.67 \ln F_r^{cent}}{0.75 - 1.27 \ln F_r^{cent} - 0.14 (\ln P_r - 0.4 - 0.67 \ln F_r^{cent})} \quad (\text{A.18})$$

$$F_r^{cent}(T) = \alpha_r \exp\left(-\frac{T}{T_r^{***}}\right) + (1 - \alpha_r) \exp\left(-\frac{T}{T_r^*}\right) + \exp\left(-\frac{T_r^{**}}{T}\right) \quad (\text{A.19})$$

Расчет третьего тела.

В общем случае величина M_r , используемая при расчете коэффициента прямой реакции в формулах (A.13), (A.14), есть линейная комбинация молярных плотностей компонент газа; компоненты эти зависят от реакции:

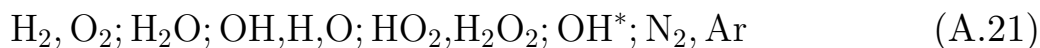
$$M_r = \sum_{k=1}^{N_C} \gamma_{rk} X_k \quad (\text{A.20})$$

Могут быть три основных варианта указания этих коэффициентов в базе данных элементарного механизма. В первом, основном, случае, указываются коэффициенты, отличные от единицы для указанных при них компонент (по умолчанию, у прочих компонент $\gamma_{rk} = 1$). Во втором случае указываются коэффициенты, отличные от нуля (а по умолчанию они

равны нулю). В третьем – не изменяемые в реакции компоненты (чаще всего единственная) указываются непосредственно в формуле реакции слева и справа, в этом случае коэффициент при этой компоненте равен 1, а для прочих компонент он равен нулю. Если же третье тело в реакции не участвует, то в формуле слева и справа не стоит ни указания $+M$, ни одинаковой компоненты на входе и выходе.

А.5 Таблица термодинамических данных

В Таблице 8 размещены коэффициенты термодинамических данных $a_{k,i}$, a_k^H , a_k^S для набора компонент, используемых в расчетах водородно-воздушных смесей. При горении водорода с кислородом, помимо основного продукта реакции, то есть водяного пара, образуется и несколько радикалов, или компонент, не существующих при нормальных условиях в стабильном состоянии длительное время. Горючая смесь может состоять из следующих компонент:



А.6 Кинетические механизмы

В приложении кинетические механизмы размещены в виде таблиц. В каждой из этих таблиц три колонки, в первой указан порядковый номер, во второй формула реакции, в третьей коэффициент прямой реакции. Реакции, в которых изменяются одни и те же компоненты, считаем одинаковыми, но если они идут несколькими различными внутренними механизмами, то их скорость определяется различными константами, эффект же от этих механизмов суммируется, тем самым в таблице их можно рассматривать как отдельные реакции. Такие реакции нумеруются с добавлением буквы (а, b, с и др.) В таблицах кинетических механизмов помещена

Таблица 8 — Термодинамические коэффициенты используемых в расчетах веществ, полученные для температурного интервала [250, 5000] К при использовании полинома 4-го порядка для аппроксимации теплоемкости.

Компонент	Коэффициенты
H ₂	$a_0 = 3.454670$ $a_1 = 8.316092 \cdot 10^{-5}$ $a_2 = 4.848818 \cdot 10^{-8}$ $a_3 = 3.312198 \cdot 10^{-11}$ $a_4 = -7.277623 \cdot 10^{-15}$ $a_h = -1033.903$ $a_s = -4.003518$
O ₂	$a_0 = 3.172267$ $a_1 = 1.241065 \cdot 10^{-3}$ $a_2 = -1.285061 \cdot 10^{-7}$ $a_3 = -7.693210 \cdot 10^{-11}$ $a_4 = 1.429705 \cdot 10^{-14}$ $a_h = -999.7957$ $a_s = 6.223241$
H ₂ O	$a_0 = 3.896391$ $a_1 = 9.384991 \cdot 10^{-5}$ $a_2 = 1.481744 \cdot 10^{-6}$ $a_3 = -5.823738 \cdot 10^{-10}$ $a_4 = 6.259942 \cdot 10^{-14}$ $a_h = -30265.28$ $a_s = 0.4084371$
OH	$a_0 = 3.820097$ $a_1 = -1.103987 \cdot 10^{-3}$ $a_2 = 1.341081 \cdot 10^{-6}$ $a_3 = -4.241550 \cdot 10^{-10}$ $a_4 = 4.185776 \cdot 10^{-14}$ $a_h = 3588.048$ $a_s = 0.5904849$
H	$a_0 = 2.500000$ $a_1 = 1.068811 \cdot 10^{-15}$ $a_2 = -1.395141 \cdot 10^{-18}$ $a_3 = 5.952106 \cdot 10^{-22}$ $a_4 = -7.452076 \cdot 10^{-26}$ $a_h = 25471.63 \cdot 10^4$ $a_s = -0.4601176$
O	$a_0 = 2.782693$ $a_1 = -7.042224 \cdot 10^{-4}$ $a_2 = 6.155409 \cdot 10^{-7}$ $a_3 = -1.961668 \cdot 10^{-10}$ $a_4 = 2.034152 \cdot 10^{-14}$ $a_h = 29168.29$ $a_s = 3.686994$
HO ₂	$a_0 = 3.205107$ $a_1 = 3.890608 \cdot 10^{-3}$ $a_2 = -1.666404 \cdot 10^{-6}$ $a_3 = 3.485702 \cdot 10^{-10}$ $a_4 = -2.772890 \cdot 10^{-14}$ $a_h = 143.0813$ $a_s = 8.191449$
H ₂ O ₂	$a_0 = 3.520307$ $a_1 = 6.990324 \cdot 10^{-3}$ $a_2 = -3.673028 \cdot 10^{-6}$ $a_3 = 9.060567 \cdot 10^{-10}$ $a_4 = -8.110226 \cdot 10^{-14}$ $a_h = -17699.69$ $a_s = 6.023073$
OH*	$a_0 = 2.921963$ $a_1 = 8.738545 \cdot 10^{-4}$ $a_2 = -7.705560 \cdot 10^{-8}$ $a_3 = -3.138497 \cdot 10^{-11}$ $a_4 = 5.265958 \cdot 10^{-15}$ $a_h = 50258.30$ $a_s = 5.407712$
N ₂	$a_0 = 3.526746$ $a_1 = -4.729673 \cdot 10^{-4}$ $a_2 = 1.378738 \cdot 10^{-6}$ $a_3 = -5.539603 \cdot 10^{-10}$ $a_4 = 6.228679 \cdot 10^{-14}$ $a_h = -1041.422$ $a_s = 3.024153$
Ar	$a_0 = 2.500000$ $a_1 = 1.068811 \cdot 10^{-15}$ $a_2 = -1.395141 \cdot 10^{-18}$ $a_3 = 5.952106 \cdot 10^{-22}$ $a_4 = -7.452076 \cdot 10^{-26}$ $a_h = -745.3750$ $a_s = 4.366001$

формула реакции, в которой символом М обозначается обобщенная компонента третьего не изменяемого в реакции тела, коэффициент прямой реакции, для расчета которого используются указанные в подписи к таблице единицы измерения. Если реакция “выпадающая”, то есть коэффициент реакции не стандартным образом зависит от температуры и молярной плотности обобщенной компоненты, то указываются его выражения в пределах высокого и низкого давления соответственно, а также в объединении второй и третьей колонки, коэффициенты метода Троу α , T^{***} , T^* , T^{**} для расчета множителя $F_{cent}(T)$. Ниже, если требуется, в объединении второй и третьей колонки указывается состав обобщенной неизменяемой компоненты.

Таблица 9 содержит данные механизма Hong [197]. Он включает все компоненты (A.21), кроме OH^* , и состоит из 20 различных химических реакций.

Таблица 9 — Химические реакции и выражения для скорости реакций в кинетическом механизме Hong (2010) [197]. Единицы: см, моль, К, кал.

№.	Реакция	Коэффициент прямой реакции
1.	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$	$1.04 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-15286/(R_G T))$
2a.	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$	$k_{\text{high}} = 5.59 \cdot 10^{13} \cdot T^{0.2}$
		$k_{\text{low}} = 2.65 \cdot 10^{19} \cdot T^{-1.3}$
	$\alpha = 0.70, T^{***} = 10^{-30}, T^* = 10^{30}, T^{**} = 10^{30}$	
	$[\text{M}] = 2.5[\text{H}_2] + 0.0[\text{H}_2\text{O}] + 12.0[\text{H}_2\text{O}_2] + 0.0[\text{O}_2] + 0.0[\text{Ar}] + 1.0[\text{others}]$	
2b.	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{Ar} = \text{HO}_2 + \text{Ar}$	$k_{\text{high}} = 5.59 \cdot 10^{13} \cdot T^{0.2}$
		$k_{\text{low}} = 6.81 \cdot 10^{18} \cdot T^{-1.2}$
	$\alpha = 0.70, T^{***} = 10^{-30}, T^* = 10^{30}, T^{**} = 10^{30}$	
2c.	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{O}_2$	$k_{\text{high}} = 5.59 \cdot 10^{13} \cdot T^{0.2}$
		$k_{\text{low}} = 5.69 \cdot 10^{18} \cdot T^{-1.1}$
	$\alpha = 0.80, T^{***} = 10^{-30}, T^* = 10^{30}, T^{**} = 10^{30}$	
2d.	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} = \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$k_{\text{high}} = 5.59 \cdot 10^{13} \cdot T^{0.2}$
		$k_{\text{low}} = 3.70 \cdot 10^{19} \cdot T^{-1.0}$
	$\alpha = 0.80, T^{***} = 10^{-30}, T^* = 10^{30}, T^{**} = 10^{30}$	
3.	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} = \text{OH} + \text{OH} + \text{M}$	$k_{\text{high}} = 8.59 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-48560/(R_G T))$
		$k_{\text{low}} = 9.55 \cdot 10^{15} \cdot \exp(-42203/(R_G T))$
	$\alpha = 1.0, T^{***} = 10^{-30}, T^* = 10^{30}, T^{**} = 10^{30}$	

Продолжение на следующей странице

№.	Реакция	Коэффициент прямой реакции
	$[M] = 9.0[H_2O] + 1.5[N_2] + 1.0[others]$	
4a.	$OH + H_2O_2 = HO_2 + H_2O$	$1.74 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-318/(R_G T))$
4b.	$OH + H_2O_2 = HO_2 + H_2O_3$	$7.59 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-7269/(R_G T))$
5.	$OH + HO_2 = H_2O + O_2$	$2.89 \cdot 10^{13} \cdot \exp(+500/(R_G T))$
6a.	$HO_2 + HO_2 = O_2 + H_2O_2$	$1.50 \cdot 10^{11} \cdot \exp(+1603/(R_G T))$
6b.	$HO_2 + HO_2 = O_2 + H_2O_2$	$4.20 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-11980/(R_G T))$
7a.	$H_2O + M = H + OH + M$	$6.06 \cdot 10^{27} \cdot T^{-3.31} \cdot \exp(-120770/(R_G T))$
	$[M] = 1.5[O_2] + 0.0[H_2O] + 2.0[N_2] + 3.0[H_2] + 1.0[others]$	
7b.	$H_2O + H_2O = H + OH + H_2O$	$1.00 \cdot 10^{26} \cdot T^{-2.44} \cdot \exp(-120160/(R_G T))$
8.	$OH + OH = H_2O + O$	$3.57 \cdot 10^4 \cdot T^{2.40} \cdot \exp(+2111/(R_G T))$
9a.	$O + H_2 = H + OH$	$3.82 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-7948/(R_G T))$
9b.	$O + H_2 = H + OH$	$8.79 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-19170/(R_G T))$
10.	$OH + H_2 = H + H_2O$	$2.17 \cdot 10^8 \cdot T^{1.52} \cdot \exp(-3457/(R_G T))$
11.	$H + HO_2 = OH + OH$	$7.08 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-300/(R_G T))$
12.	$H + HO_2 = H_2O + O$	$1.45 \cdot 10^{12}$
13.	$H + HO_2 = H_2 + O_2$	$3.66 \cdot 10^6 \cdot T^{2.087} \cdot \exp(+1450/(R_G T))$
14.	$O + HO_2 = OH + O_2$	$1.63 \cdot 10^{13} \cdot \exp(+445/(R_G T))$
15.	$H + H_2O_2 = HO_2 + H_2$	$1.21 \cdot 10^7 \cdot T^{2.0} \cdot \exp(-5200/(R_G T))$
16.	$H + H_2O_2 = H_2O + OH$	$1.02 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-3577/(R_G T))$
17.	$O + H_2O_2 = OH + HO_2$	$8.43 \cdot 10^{11} \cdot \exp(-3970/(R_G T))$
18a.	$H_2 + M = H + H + M$	$5.84 \cdot 10^{18} \cdot T^{-1.1} \cdot \exp(-104380/(R_G T))$
	$[M] = 0.0[H_2] + 14.4[H_2O] + 0.0[O_2] + 0.0[N_2] + 1.0[others]$	
18b.	$H_2 + H_2 = H + H + H_2$	$9.03 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-96070/(R_G T))$
18c.	$H_2 + N_2 = H + H + N_2$	$4.58 \cdot 10^{19} \cdot T^{-1.4} \cdot \exp(-104380/(R_G T))$
18d.	$H_2 + O_2 = H + H + O_2$	$4.58 \cdot 10^{19} \cdot T^{-1.4} \cdot \exp(-104380/(R_G T))$
19a.	$O + O + M = O_2 + M$	$6.16 \cdot 10^{15} \cdot T^{-0.5}$
	$[M] = 2.5[H_2] + 12.0[H_2O] + 0.0[Ar] + 1.0[others]$	
19b.	$O + O + Ar = O_2 + Ar$	$1.89 \cdot 10^{13} \cdot \exp(+1788/(R_G T))$
20.	$O + H + M = OH + M$	$4.71 \cdot 10^{18} \cdot T^{-1.0}$
	$[M] = 2.5[H_2] + 12.0[H_2O] + 0.75[Ar] + 1.0[others]$	

Таблица 10 содержит механизм Tereza [198]. Механизм включает все перечисленные (A.21) компоненты. Всего кинетика Tereza содержит 23 различные химические реакции.

Таблица 10 — Химические реакции и выражения скорости реакций для механизма Tereza (2019) [198], подсистема $\text{H}_2 + \text{O}_2$ с участием OH^* . Единицы измерения: см, моль, К, кал.

№.	Реакция	Коэффициент прямой реакции
1.	$\text{H}_2 + \text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{H}$	$5.916 \cdot 10^5 \cdot T^{2.433} \cdot \exp(-53502/(R_G T))$
2.	$\text{H}_2 + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{OH}$	$3.000 \cdot 10^{11} \cdot \exp(-40000/(R_G T))$
3.	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$	$1.040 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-15286/(R_G T))$
4.	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$	$k_{\text{high}} = 5.116 \cdot 10^{12} \cdot T^{0.440}$
		$k_{\text{low}} = 3.700 \cdot 10^{19} \cdot T^{-1.0}$
	$\alpha = 0.50, T^{***} = 10^{-30}, T^* = 10^{30}, T^{**} = 10^{30}$	
	$[\text{M}] = 11.89[\text{H}_2\text{O}] + 0.85[\text{O}_2] + 0.4[\text{Ar}] + 1.0[\text{others}]$	
5.	$\text{O} + \text{HO}_2 = \text{OH} + \text{O}_2$	$1.740 \cdot 10^{13} \cdot \exp(+400/(R_G T))$
6.	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{OH} + \text{OH}$	$1.700 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-870/(R_G T))$
7.	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$3.020 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-1720/(R_G T))$
8.	$\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	$2.890 \cdot 10^{13} \cdot \exp(+500/(R_G T))$
9.	$\text{O} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{OH}$	$5.130 \cdot 10^4 \cdot T^{2.67} \cdot \exp(-6280/(R_G T))$
10.	$\text{OH} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$5.360 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-2106/(R_G T))$
11.	$\text{OH} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{H}_2\text{O}$	$2.170 \cdot 10^8 \cdot T^{1.52} \cdot \exp(-3457/(R_G T))$
12.	$\text{OH} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O}_2 + \text{M}$	$k_{\text{high}} = 1.11 \cdot 10^{14} \cdot T^{-0.37}$
		$k_{\text{low}} = 2.010 \cdot 10^{17} \cdot T^{-0.584} \cdot \exp(+2293/(R_G T))$
	$\alpha = 0.7346, T^{***} = 94, T^* = 1756, T^{**} = 5182$	
	$[\text{M}] = 2.0[\text{H}_2] + 6.0[\text{H}_2\text{O}] + 0.7[\text{Ar}] + 1.0[\text{others}]$	
13.	$\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{HO}_2$	$5.37 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-39740/(R_G T))$
14.	$\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$1.74 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-320/(R_G T))$
15.	$\text{H} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{H}_2$	$1.70 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-3750/(R_G T))$
16.	$\text{H} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{OH}$	$1.02 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-3577/(R_G T))$
17.	$\text{O} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{OH} + \text{HO}_2$	$9.55 \cdot 10^6 \cdot T^{2.20} \cdot \exp(-4000/(R_G T))$
18.	$\text{H}_2\text{O} + \text{M} = \text{H} + \text{OH} + \text{M}$	$3.47 \cdot 10^{15} \cdot \exp(-105200/(R_G T))$
	$[\text{M}] = 1.0[\text{H}_2] + 1.0[\text{others}]$	

Продолжение на следующей странице

№.	Реакция	Коэффициент прямой реакции
19.	$O_2 + M = O + O + M$	$1.82 \cdot 10^{18} \cdot T^{-1.0} \cdot \exp(-118100/(R_G T))$
	$[M] = 1.0[H_2] + 1.0[others]$	
20.	$H_2 + M = H + H + M$	$2.24 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-96080/(R_G T))$
	$[M] = 1.0[H_2] + 1.0[others]$	
21.	$O + H + M = OH + M$	$4.68 \cdot 10^{18} \cdot T^{-1.0}$
	$[M] = 1.0[H_2] + 1.0[others]$	
22.	$H + O + M = OH^* + M$	$1.50 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-5975/(R_G T))$
	$[M] = 6.5[H_2O] + 0.4[O_2] + 0.4[N_2] + 0.35[Ar] + 1.0[others]$	
23a.	$OH^* + H_2O = OH + H_2O$	$5.93 \cdot 10^{12} \cdot T^{-0.5} \cdot \exp(+860/(R_G T))$
23b.	$OH^* + H_2 = OH + H_2$	$2.95 \cdot 10^{12} \cdot T^{-0.5} \cdot \exp(+444/(R_G T))$
23c.	$OH^* + N_2 = OH + N_2$	$1.08 \cdot 10^{11} \cdot T^{-0.5} \cdot \exp(+1242/(R_G T))$
23d.	$OH^* + OH = OH + OH$	$6.01 \cdot 10^{12} \cdot T^{-0.5} \cdot \exp(+764/(R_G T))$
23e.	$OH^* + H = OH + H$	$1.31 \cdot 10^{12} \cdot T^{-0.5} \cdot \exp(+167/(R_G T))$
23f.	$OH^* + Ar = OH + Ar$	$1.69 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-4135/(R_G T))$
23g.	$OH^* = OH$	$1.45 \cdot 10^6$
23h.	$OH^* + O_2 = OH + O_2$	$2.10 \cdot 10^{12} \cdot T^{-0.5} \cdot \exp(+478/(R_G T))$

Таблица 11 содержит механизм GRI Mech 3.0 (1999) [199], подсистема горения водорода. Механизм содержит все компоненты (A.21), кроме OH^* . Число различных реакций в этом механизме равно 20.

Таблица 11 — Химические реакции и выражения скорости реакций для механизма GRI Mech 3.0 (1999) [199], подсистема H_2+O_2 . Единицы измерения: см, моль, К, кал.

№.	Реакция	Коэффициент прямой реакции
1.	$O + O + M = O_2 + M$	$1.20 \cdot 10^{17} \cdot T^{-1.0}$
	$[M] = 15.4[H_2O] + 2.4[H_2] + 0.83[Ar] + 1.0[others]$	
2.	$O + H + M = OH + M$	$5.00 \cdot 10^{17} \cdot T^{-1.0}$
	$[M] = 6.0[H_2O] + 2.0[O_2] + 0.7[Ar] + 1.0[others]$	
3.	$O + H_2 = H + OH$	$3.87 \cdot 10^4 \cdot T^{2.70} \cdot \exp(-6260/(R_G T))$
4.	$O + HO_2 = OH + O_2$	$2.0 \cdot 10^{13}$
5.	$O + H_2O_2 = OH + HO_2$	$9.63 \cdot 10^6 \cdot T^{2.20} \cdot \exp(-4000/(R_G T))$

Продолжение на следующей странице

Но.	Реакция	Коэффициент прямой реакции
6a.	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$	$2.80 \cdot 10^{18} \cdot T^{-0.86}$
	$[\text{M}] = 0[\text{O}_2] + 0[\text{H}_2\text{O}] + 0[\text{N}_2] + 0[\text{Ar}] + 1.0[\text{others}]$	
6b.	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{O}_2$	$2.08 \cdot 10^{19} \cdot T^{-1.24}$
6c.	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} = \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$1.126 \cdot 10^{19} \cdot T^{-0.76}$
6d.	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{N}_2 = \text{HO}_2 + \text{N}_2$	$2.60 \cdot 10^{19} \cdot T^{-1.24}$
6e.	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{Ar} = \text{HO}_2 + \text{Ar}$	$7.0 \cdot 10^{17} \cdot T^{-0.80}$
7.	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$	$2.65 \cdot 10^{16} \cdot T^{-0.6707} \cdot \exp(-17041/(R_G T))$
8a.	$\text{H} + \text{H} + \text{M} = \text{H}_2 + \text{M}$	$1.0 \cdot 10^{18} \cdot T^{-1.0}$
	$[\text{M}] = 0[\text{H}_2\text{O}] + 0[\text{H}_2] + 0.63[\text{Ar}] + 1.0[\text{others}]$	
8b.	$\text{H} + \text{H} + \text{H}_2 = \text{H}_2 + \text{H}_2$	$9.0 \cdot 10^{16} \cdot T^{-0.60}$
8c.	$\text{H} + \text{H} + \text{H}_2\text{O} = \text{H}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$6.0 \cdot 10^{19} \cdot T^{-1.25}$
9.	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	$2.20 \cdot 10^{22} \cdot T^{-2.0}$
	$[\text{M}] = 3.65[\text{H}_2\text{O}] + 0.73[\text{H}_2] + 0.38[\text{Ar}] + 1.0[\text{others}]$	
10.	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$3.97 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-671/(R_G T))$
11.	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{H}_2 + \text{O}_2$	$4.48 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-1068/(R_G T))$
12.	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{OH} + \text{OH}$	$8.40 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-635/(R_G T))$
13.	$\text{H} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{H}_2$	$1.21 \cdot 10^7 \cdot T^{2.20} \cdot \exp(-5200/(R_G T))$
14.	$\text{H} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{OH}$	$1.0 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-3600/(R_G T))$
15.	$\text{OH} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{H}_2\text{O}$	$2.16 \cdot 10^8 \cdot T^{1.51} \cdot \exp(-3430/(R_G T))$
16.	$\text{OH} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O}_2 + \text{M}$	$k_{\text{high}} = 7.40 \cdot 10^{13} \cdot T^{-0.37}$
		$k_{\text{low}} = 2.30 \cdot 10^{18} \cdot \exp(-1700/(R_G T))$
	$\alpha = 0.7346, T^{***} = 94, T^* = 1756, T^{**} = 5182$	
	$[\text{M}] = 2.0[\text{H}_2] + 6.0[\text{H}_2\text{O}] + 0.7[\text{Ar}] + 1.0[\text{others}]$	
17.	$\text{OH} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$3.57 \cdot 10^4 \cdot T^{2.40} \cdot \exp(-2110/(R_G T))$
18.	$\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	$1.45 \cdot 10^{13} \cdot \exp(+500/(R_G T))$
19a.	$\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$2.0 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-427/(R_G T))$
19b.	$\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$1.70 \cdot 10^{18} \cdot \exp(-29410/(R_G T))$
20a.	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 = \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}_2$	$1.30 \cdot 10^{11} \cdot \exp(+1630/(R_G T))$
20b.	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 = \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}_2$	$4.20 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-12000/(R_G T))$

Таблица 12 содержит механизм Maas & Pore, 1992 [200], подсистема горения водорода. Механизм содержит все компоненты (A.21), кроме OH* и Ar. Число различных реакций в этом механизме равно 19.

Таблица 12 — Химические реакции и выражения скорости реакций для механизма Маас & Роу (1992) [200], подсистема $\text{H}_2 + \text{O}_2$. Единицы измерения: см, моль, К, кДж.

№.	Реакция	Коэффициент прямой реакции
1.	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$	$2.0 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-70.3/(R_G T))$
2.	$\text{O} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{OH}$	$5.06 \cdot 10^4 \cdot T^{2.67} \cdot \exp(-26.3/(R_G T))$
3.	$\text{OH} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{H}_2\text{O}$	$1.0 \cdot 10^8 \cdot T^{1.60} \cdot \exp(-13.8/(R_G T))$
4.	$\text{OH} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$1.50 \cdot 10^9 \cdot T^{1.14} \cdot \exp(-0.4/(R_G T))$
5.	$\text{H} + \text{H} + \text{M} = \text{H}_2 + \text{M}$	$1.0 \cdot 10^{18} \cdot T^{-1.0}$
	$[\text{M}] = 0.35[\text{O}_2] + 6.5[\text{H}_2\text{O}] + 0.5[\text{N}_2] + 1.0[\text{others}]$	
6.	$\text{O} + \text{O} + \text{M} = \text{O}_2 + \text{M}$	$2.90 \cdot 10^{17} \cdot T^{-1.0}$
	$[\text{M}] = 0.35[\text{O}_2] + 6.5[\text{H}_2\text{O}] + 0.5[\text{N}_2] + 1.0[\text{others}]$	
7.	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	$2.20 \cdot 10^{22} \cdot T^{-2.0}$
	$[\text{M}] = 0.35[\text{O}_2] + 6.5[\text{H}_2\text{O}] + 0.5[\text{N}_2] + 1.0[\text{others}]$	
8.	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$	$2.30 \cdot 10^{18} \cdot T^{-0.8}$
	$[\text{M}] = 0.35[\text{O}_2] + 6.5[\text{H}_2\text{O}] + 0.5[\text{N}_2] + 1.0[\text{others}]$	
9.	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{OH} + \text{OH}$	$1.50 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-4.2/(R_G T))$
10.	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{H}_2 + \text{O}_2$	$2.50 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-2.9/(R_G T))$
11.	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$3.0 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-7.2/(R_G T))$
12.	$\text{O} + \text{HO}_2 = \text{OH} + \text{O}_2$	$1.80 \cdot 10^{13} \cdot \exp(+1.7/(R_G T))$
13.	$\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	$6.0 \cdot 10^{13}$
14.	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 = \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}_2$	$2.50 \cdot 10^{11} \cdot \exp(+5.2/(R_G T))$
15.	$\text{OH} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O}_2 + \text{M}$	$3.25 \cdot 10^{22} \cdot T^{-2.0}$
	$[\text{M}] = 0.35[\text{O}_2] + 6.5[\text{H}_2\text{O}] + 0.5[\text{N}_2] + 1.0[\text{others}]$	
16.	$\text{H} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{H}_2$	$1.70 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-15.7/(R_G T))$
17.	$\text{H} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{OH}$	$1.0 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-15.0/(R_G T))$
18.	$\text{O} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{OH} + \text{HO}_2$	$2.80 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-26.8/(R_G T))$
19.	$\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$5.4 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-4.2/(R_G T))$

Таблица 13 содержит кинетический механизм Li, Zhao, Kazakov & Dryer (2004) [201]. В механизме участвуют все компоненты списка (A.21), кроме возбужденного гидроксила OH^* . Число различных реакций в механизме равно 19.

Таблица 13 — Химические реакции и выражения скорости реакций для механизма Li, Zhao, Kazakov & Dryer (2004) [201], Единицы измерения: см, моль, К, ккал.

Но.	Реакция	Коэффициент прямой реакции
1.	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$	$3.55 \cdot 10^{15} \cdot T^{-0.41} \cdot \exp(-16.6/(R_G T))$
2.	$\text{O} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{OH}$	$5.08 \cdot 10^4 \cdot T^{2.67} \cdot \exp(-6.29/(R_G T))$
3.	$\text{OH} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{H}_2\text{O}$	$2.16 \cdot 10^8 \cdot T^{1.51} \cdot \exp(-3.43/(R_G T))$
4.	$\text{H}_2\text{O} + \text{O} = \text{OH} + \text{OH}$	$2.97 \cdot 10^6 \cdot T^{2.02} \cdot \exp(-13.4/(R_G T))$
5a.	$\text{H}_2 + \text{M} = \text{H} + \text{H} + \text{M}$	$4.58 \cdot 10^{19} \cdot T^{-1.40} \cdot \exp(-104.38/(R_G T))$
	$[\text{M}] = 2.5[\text{H}_2] + 12.0[\text{H}_2\text{O}] + 0[\text{Ar}] + 1.0[\text{others}]$	
5b.	$\text{H}_2 + \text{Ar} = \text{H} + \text{H} + \text{Ar}$	$5.84 \cdot 10^{18} \cdot T^{-1.0} \cdot \exp(-104.38/(R_G T))$
6a.	$\text{O} + \text{O} + \text{M} = \text{O}_2 + \text{M}$	$6.16 \cdot 10^{15} \cdot T^{-0.5}$
	$[\text{M}] = 2.5[\text{H}_2] + 12.0[\text{H}_2\text{O}] + 0[\text{Ar}] + 1.0[\text{others}]$	
6b.	$\text{O} + \text{O} + \text{Ar} = \text{O}_2 + \text{Ar}$	$1.89 \cdot 10^{13} \cdot \exp(+1.79/(R_G T))$
7.	$\text{O} + \text{H} + \text{M} = \text{OH} + \text{M}$	$4.71 \cdot 10^{18} \cdot T^{-1.0}$
	$[\text{M}] = 2.5[\text{H}_2] + 12.0[\text{H}_2\text{O}] + 0.75[\text{Ar}] + 1.0[\text{others}]$	
8.	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	$3.80 \cdot 10^{22} \cdot T^{-2.2}$
	$[\text{M}] = 2.5[\text{H}_2] + 12.0[\text{H}_2\text{O}] + 0.38[\text{Ar}] + 1.0[\text{others}]$	
9.	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$	$k_{\text{high}} = 1.48 \cdot 10^{12} \cdot T^{0.60}$
		$k_{\text{low}} = 6.37 \cdot 10^{20} \cdot T^{-1.72} \cdot \exp(-0.52/(R_G T))$
	$\alpha = 0.80, T^{***} = 10^{-30}, T^* = 10^{30}, T^{**} = 10^{30}$	
	$[\text{M}] = 2.0[\text{H}_2] + 11.0[\text{H}_2\text{O}] + 0.78[\text{O}_2] + 1.0[\text{others}]$	
10.	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{H}_2 + \text{O}_2$	$1.66 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-0.82/(R_G T))$
11.	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{OH} + \text{OH}$	$7.08 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-0.30/(R_G T))$
12.	$\text{O} + \text{HO}_2 = \text{OH} + \text{O}_2$	$3.25 \cdot 10^{13}$
13.	$\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	$2.89 \cdot 10^{13} \cdot \exp(+0.50/(R_G T))$
14a.	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 = \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}_2$	$4.20 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-11.98/(R_G T))$
14b.	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 = \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}_2$	$1.30 \cdot 10^{11} \cdot \exp(+1.63/(R_G T))$
15.	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} = \text{OH} + \text{OH} + \text{M}$	$k_{\text{high}} = 2.95 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-48.4/(R_G T))$
		$k_{\text{low}} = 1.20 \cdot 10^{17} \cdot \exp(-45.5/(R_G T))$
	$\alpha = 0.50, T^{***} = 10^{-30}, T^* = 10^{30}, T^{**} = 10^{30}$	
	$[\text{M}] = 2.5[\text{H}_2] + 12.0[\text{H}_2\text{O}] + 0.64[\text{Ar}] + 1.0[\text{others}]$	
16.	$\text{H} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{OH}$	$2.41 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-3.97/(R_G T))$

Продолжение на следующей странице

№.	Реакция	Коэффициент прямой реакции
17.	$\text{H} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{H}_2$	$4.82 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-7.95/(R_G T))$
18.	$\text{O} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{OH} + \text{HO}_2$	$9.63 \cdot 10^6 \cdot T^{2.0} \cdot \exp(-3.97/(R_G T))$
19a.	$\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$5.80 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-9.56/(R_G T))$
19b.	$\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$1.00 \cdot 10^{12}$

Таблица 14 содержит кинетический механизм Williams (2004)[202]. Механизм содержит все компоненты А.21, кроме OH^* . Реакций в механизме 22.

Таблица 14 — Химические реакции и выражения скорости реакций для механизма Williams (2004) [202]. Единицы: см, моль, К, кДж.

№.	Реакция	Коэффициент прямой реакции
1.	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$	$3.20 \cdot 10^{16} \cdot T^{-0.70} \cdot \exp(-71.42/(R_G T))$
2.	$\text{O} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{OH}$	$5.06 \cdot 10^4 \cdot T^{2.67} \cdot \exp(-26.32/(R_G T))$
3.	$\text{OH} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{H}_2\text{O}$	$1.17 \cdot 10^9 \cdot T^{1.30} \cdot \exp(-15.21/(R_G T))$
4.	$\text{H}_2\text{O} + \text{O} = \text{OH} + \text{OH}$	$7.60 \cdot T^{3.84} \cdot \exp(-53.47/(R_G T))$
5.	$\text{O} + \text{H} + \text{M} = \text{OH} + \text{M}$	$6.20 \cdot 10^{16} \cdot T^{-0.60}$
	$[\text{M}] = 2.5[\text{H}_2] + 12.0[\text{H}_2\text{O}] + 1.0[\text{others}]$	
6.	$\text{H}_2 + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{OH}$	$1.70 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-200.05/(R_G T))$
7.	$\text{H} + \text{H} + \text{M} = \text{H}_2 + \text{M}$	$7.20 \cdot 10^{17} \cdot T^{-1.0}$
	$[\text{M}] = 2.5[\text{H}_2] + 16.3[\text{H}_2\text{O}] + 1.0[\text{others}]$	
8.	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	$2.20 \cdot 10^{22} \cdot T^{-2.20}$
	$[\text{M}] = 2.5[\text{H}_2] + 12.0[\text{H}_2\text{O}] + 1.0[\text{others}]$	
9.	$\text{O} + \text{O} + \text{M} = \text{O}_2 + \text{M}$	$6.17 \cdot 10^5 \cdot T^{-0.50}$
	$[\text{M}] = 2.5[\text{H}_2] + 12.0[\text{H}_2\text{O}] + 1.0[\text{others}]$	
10.	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$	$k_{\text{high}} = 4.65 \cdot 10^{12} \cdot T^{0.44}$
		$k_{\text{low}} = 2.60 \cdot 10^{19} \cdot T^{-1.20}$
	$\alpha = 1.0, T^{***} = 10^{-10}, T^* = 345.0, T^{**} = 345.0$	
	$[\text{M}] = 0.3[\text{O}_2] + 12.0[\text{H}_2\text{O}] + 1.0[\text{others}]$	
11.	$\text{O} + \text{OH} + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$	$1.00 \cdot 10^{16}$
	$[\text{M}] = 1.0[\text{H}_2] + 1.0[\text{others}]$	
12.	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{OH} + \text{OH}$	$1.70 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-3.66/(R_G T))$
13.	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{H}_2 + \text{O}_2$	$4.48 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-5.90/(R_G T))$
14.	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$3.10 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-7.20/(R_G T))$

Продолжение на следующей странице

№.	Реакция	Коэффициент прямой реакции
15.	$O + HO_2 = OH + O_2$	$2.00 \cdot 10^{13}$
16.	$OH + HO_2 = H_2O + O_2$	$2.89 \cdot 10^{13} \cdot \exp(+2.08/(R_G T))$
17.	$OH + OH + M = H_2O_2 + M$	$k_{high} = 7.40 \cdot 10^{13} \cdot T^{-0.37}$
		$k_{low} = 2.30 \cdot 10^{18} \cdot T^{-0.9} \cdot \exp(+7.12/(R_G T))$
	$\alpha = 0.7346, T^{***} = 94.0, T^* = 1756.0, T^{**} = 5182.0$	
	$[M] = 2.0[H_2] + 6.0[H_2O] + 1.0[others]$	
18.	$H + HO_2 = O_2 + H_2O_2$	$3.20 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-5.80/(R_G T))$
19.	$H + H_2O_2 = HO_2 + H_2$	$4.79 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-33.3/(R_G T))$
20.	$H + H_2O_2 = H_2O + OH$	$1.00 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-15.0/(R_G T))$
21.	$OH + H_2O_2 = HO_2 + H_2O$	$7.08 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-6.00/(R_G T))$
22.	$O + H_2O_2 = OH + HO_2$	$9.63 \cdot 10^6 \cdot T^{2.0} \cdot \exp(-16.7/(R_G T))$

А.7 Конфигурация источников возмущения детонации

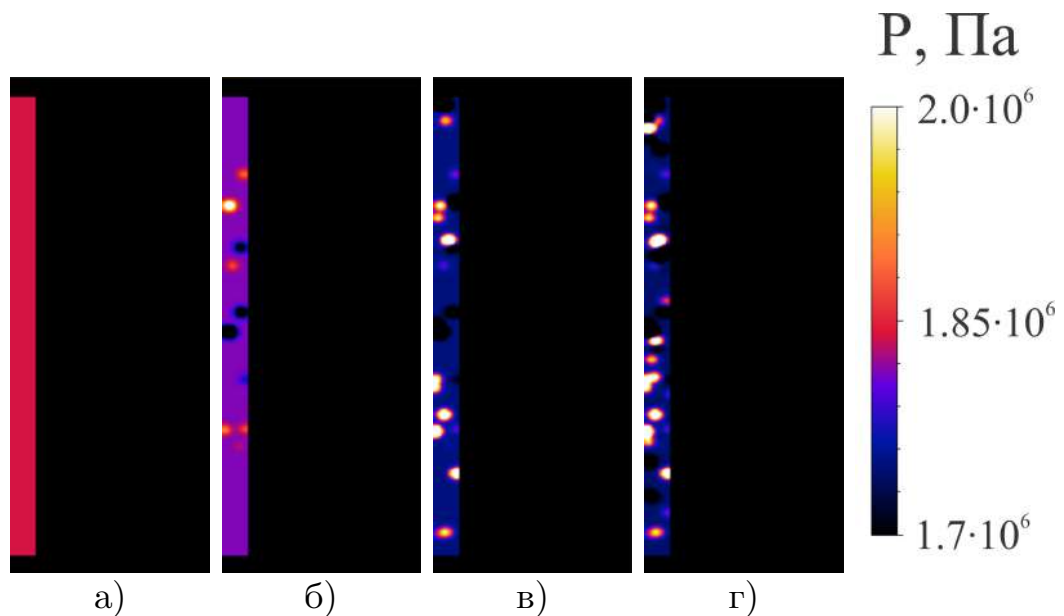


Рисунок А.1 — Расположение источников возмущающих фронт детонации.