

**Численное моделирование сжигания топлива в стационарной
детонационной волне в канале переменного сечения со
сверхзвуковым потоком на входе и выходе**

Гидаспов В.Ю.* , Кононов Д.С.**

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), МАИ, Волоколамское шоссе, 4, Москва, А-80, ГСП-3, 125993, Россия

**e-mail: gidaspov@mai.ru*

***e-mail: dr.kononoff@yandex.ru*

Статья поступила 18.11.2019

Аннотация

Рассматривается течение водородо-воздушной горючей смеси в канале переменного сечения, представляющего собой два последовательно расположенных сопла Лавалья. Считается, что входной сверхзвуковой поток тормозится и сжигается в детонационной волне, которая реализуется внутри канала. Ниже по потоку продукты сгорания разгоняются до сверхзвуковых скоростей. Получены стационарные решения для случая химически неравновесных течений. Путем численного моделирования квазиодномерных течений многокомпонентного реагирующего газа показано, что детонационная волна устойчива в расширяющемся канале и неустойчива в сужающемся. Для рассматриваемой формы канала численно определен диапазон начальных скоростей потока, при котором реализуется устойчивая стационарная детонационная волна.

Ключевые слова: численное моделирование, канал переменного сечения, детонационные волны, стационарное течение, прямая задача теории сопла, неравновесные химические превращения.

Введение

Численное моделирование течений в каналах является важным этапом при создании перспективных энергетических установок [1-7]. Особый интерес представляет изучение процесса сжигания топлива в каналах в стационарных детонационных волнах, который может быть использован при разработке детонационных двигателей. В работе исследуется случай детонационного горения стехиометрической смеси водорода с воздухом в канале переменного сечения (рис. 1), представляющего собой два последовательно расположенных сопла Лавала [8].

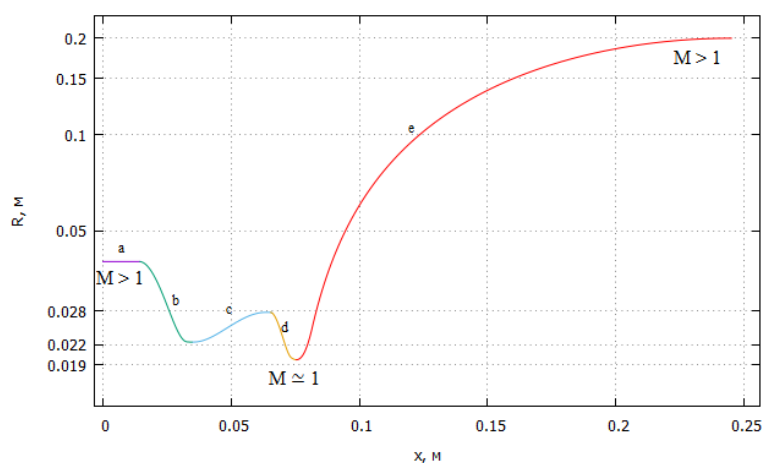


Рис. 1. Зависимость величины радиуса канала от продольной координаты. Фиолетовым цветом (а) обозначена область постоянного сечения, зеленым (б) – 1-ая сужающаяся область, синим (с) – 1-ая расширяющаяся область, оранжевым (д) – 2-ая сужающаяся область, красным (е) – 2-ая расширяющаяся область.

Течение газа на входе в канал (область «а») задавалось сверхзвуковым, внутри канала (области «б», «с», «д») считалось, что реализуется ударная волна, в которой

происходило торможение потока до дозвуковых скоростей и сжигание горючей смеси. За ударной волной продукты сгорания разгонялись до сверхзвуковой скорости (области «d» и «e»). В химически равновесной квазиодномерной стационарной постановке задачи по методике [9] для канала (рис. 1) был проведен анализ возможных вариантов течения со стационарной детонационной волной. В данном случае решение зависит исключительно от соотношений радиусов в текущем, начальном и минимальном поперечном сечении канала. Для исследуемых канала и горючей смеси определены относительные радиусы расположения детонационной волны (рис. 2) в зависимости от скорости потока во входном сечении. При начальных скоростях потока: от 2200 до 2550 м/с стационарная детонационная волна может находиться только на участке «d»; от 2550 до 5500 м/с на участках «b», «c», «d».

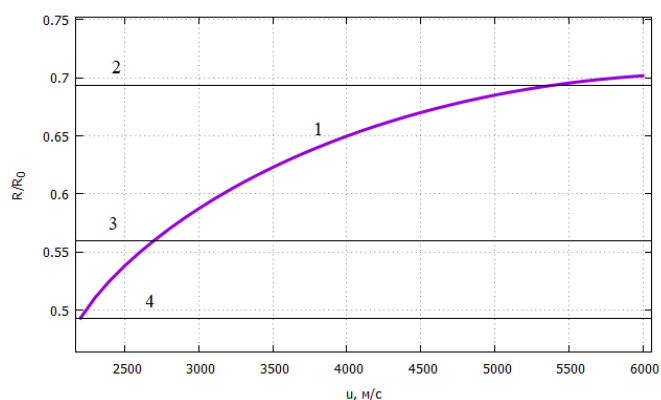


Рис. 2. Химически равновесная смесь водород-воздух. 1 – зависимость относительного радиуса поперечного сечения канала, в котором может реализоваться стационарная детонационная волна, от скорости потока на входе в канал. 2 – 4 - относительный радиус стыка областей «c»-«d», «b»-«c» и «d»-«e» .

Физико-математическая модель

Квазиодномерное стационарное химически реагирующее течение смеси совершенных газов описывается системой дифференциальных уравнений вида [10-14]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\rho u F}{dx} = 0, \\ \frac{d(\rho u^2 + p)F}{dx} = P \frac{dF}{dx}, \\ \frac{d\rho u F \left(h + \frac{u^2}{2} \right)}{dx} = 0, \\ \frac{d\rho u F \gamma_i}{dx} = F W_i, i = 1..N, \\ \rho = \rho(p, T, \bar{\gamma}) \\ h = h(p, T, \bar{\gamma}) \end{array} \right.$$

Здесь x – продольная координата, t – время, ρ – плотность, u – скорость смеси, P – давление, T – температура, h – энтальпия, γ_i – концентрация i -ого компонента в смеси, $F = F(x)$ – зависимость площади поперечного сечения канала от продольной координаты. На ударной волне выполняются соотношения типа Рэнкина-Гюгонио:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 v_1 = \rho_2 v_2, \\ p_1 + \rho_1 v_1^2 = p_2 + \rho_2 v_2^2, \\ h_1 + \frac{v_1^2}{2} = h_2 + \frac{v_2^2}{2}, \\ \bar{\gamma}_1 = \bar{\gamma}_2 \end{array} \right.$$

где индексом «2» помечены величины после ударной волны, индексом «1» – до, $v = D - u$, где D – скорость распространения разрыва.

Следствием системы уравнений, описывающих течение газа, является уравнение скорости потока:

$$(M^2 - 1) \frac{du}{dx} = \frac{1}{\rho^2 H_T} \sum_{i=1}^N (H_T \rho_{\gamma_i} - \rho_T H_{\gamma_i}) W_i + \frac{u}{F} \frac{dF}{dx}$$

где $M = \frac{u}{a}$ – число Маха, нижние индексы “Т” и “ γ_i ” обозначают частное дифференцирование по соответствующему параметру. В неравновесных течениях для разгона дозвукового потока до сверхзвуковых скоростей необходимо одновременное выполнение условий:

$$M = 1, \quad \frac{1}{\rho^2 H_T} \sum_{i=1}^N (H_T \rho_{\gamma_i} - \rho_T H_{\gamma_i}) W_i + \frac{u}{F} \frac{dF}{dx} = 0,$$

в равновесных и замороженных течениях необходимы равенства:

$$M = 1, \quad \frac{dF}{dx} = 0.$$

Данные условия являются дополнительными граничными условиями при поиске решений уравнений газовой динамики с переходом через скорость звука в одномерных стационарных постановках.

Рассматривалась смесь совершенных газов, термодинамические свойства которой описываются путем задания потенциала Гиббса [15, 16]:

$$G(p, T, \bar{\gamma}) = \sum_{i=1}^N \gamma_i \left(G_i^0(T) + RT \ln \frac{p_i}{p_0} \right),$$

где R – универсальная газовая постоянная; p_0 – нормальное давление; $p_i = p \frac{\gamma_i}{\sum_{j=1}^N \gamma_j}$ –

парциальное давление; $G_i^0(T)$ – известные зависимости [15], температурная часть

молярного потенциала Гиббса отдельного компонента смеси. Соответствующие термическое и калорическое уравнения состояния имеют вид:

$$\rho(p, T, \bar{\gamma}) = \frac{p}{RT \sum_{i=1}^N \gamma_i}, \quad h(T, \gamma_i) = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T),$$

где $H_i^0(T) = G_i^0(T) - dG_i^0(T)/dT$.

Для решения исходной системы в областях непрерывности течения используется двухточечная разностная аппроксимация:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_2 u_2 F_2 = \rho_1 u_1 F_1 = Q_0, \\ \frac{1}{2} (\rho_2 u_2 + \rho_1 u_1) (u_2 - u_1) + p_2 - p_1 = 0, \\ h_2 + \frac{u_2^2}{2} = H_0, \\ \gamma_{i2} - \gamma_{i1} - \left(s \frac{W_{i2}}{\rho_2 u_2} - (1-s) \frac{W_{i1}}{\rho_1 u_1} \right) (x_2 - x_1) = 0, i = 1..N, \\ p = \rho T R \sum_{i=1}^N \gamma_i, \\ h = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T), \end{array} \right.$$

где H_0 – полная энтальпия, Q_0 – расход газа, s – параметр неявной схемы (в расчетах $s=0,4$).

Интегрирование жесткой системы дифференциальных уравнений химической кинетики проводилось методом Пирумова У. Г. [10], на каждой итерации которого плотность и температура (входящие в правые части системы) вычислялись из приведенной выше системы нелинейных уравнений. Прохождение особой точки системы ($M=1$) осуществлялось с использованием метода «пристрелки» [10] с некоторыми модификациями.

Алгоритм прохождения особой точки

Данный алгоритм позволяет получить квазиодномерное стационарное решение со стоячей детонационной волной в продольной координате x контура с заданными составом смеси и базисными термодинамическими параметрами путем варьирования координаты постановки детонационной волны.

1. Поиск квазиодномерного стационарного решения со стоячей детонационной волной в химически равновесной постановке, получение продольной координаты детонационной волны x_1 при заданных параметрах входного потока [9] (рис. 3, кривые 2, 3).

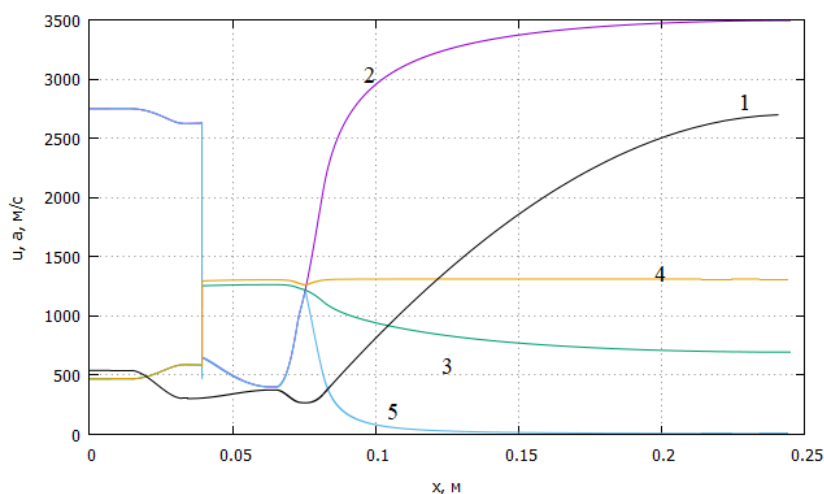


Рис. 3. Скорости потока и звука в равновесном и неравновесном течении водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К, $v_0 = 2750$ м/с. 1 – форма канала; 2, 3 – скорость потока и скорость звука, равновесие, решение с переходом через скорость звука; 4, 5 – скорость звука и скорость потока, неравновесное дозвуковое решение.

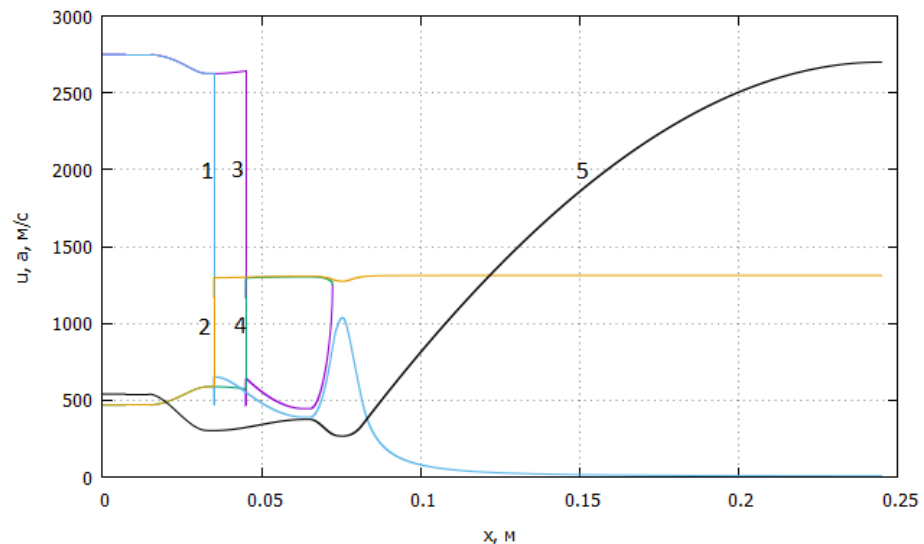


Рис. 4. Варьирование координаты стационарной детонационной волны. 1, 2 – скорость потока и скорость звука, дозвуковое стационарное неравновесное решение за детонационной волной; 3, 4 – скорость потока и скорость звука, отсутствие стационарного неравновесного решения за детонационной волной (запирание); 5 – форма канала.

2. Проведение квазиодномерного стационарного химически неравновесного расчета с входными параметрами потока из п.1 и постановкой детонационной волны в продольной координате x_1 , получение решения без перехода через скорость звука (Рис. 3, кривые 4, 5).
3. Поиск такой продольной координаты детонационной волны x_2 , при которой стационарное решение с детонационной волной отсутствует, т.н. «режим запирания потока» (Рис. 4, кривые 3, 4).
4. Поиск методом дихотомии на отрезке $[x_1, x_2]$ ближайших к x_2 с точностью до $\varepsilon > 0$ точек x_3 нахождения ударной волны, при которой существует $u_1(x)$ и отсутствует $u_2(x)$ дозвуковое решение в данном контуре. Нахождение точки $x_4 > x_3$ такой, что $|u_1(x_4) - u_2(x_4)| = \delta > 0$.

5. Нахождение на отрезке $[x_3, x_4]$ точки $x_{\text{ОСДЗ}}$, ближайшей к x_4 , такой, что при решении исходной системы с $x > x_{\text{ОСДЗ}}$ в предположении, что $u \frac{du}{dx} = \text{const} = u'_1(x_{\text{ОСДЗ}})$, энтропия смеси не убывает. Данное решение проводится до точки $x_{\text{ОССЗ}}$, в которой выполняются оба условия $M^2 - 1 > 0$ и
- $$\frac{1}{\rho^2 H_T} \sum_{i=1}^N (H_T \rho_{\gamma_i} - \rho_T H_{\gamma_i}) W_i + \frac{u}{F} \frac{dF}{dx} > 0.$$
6. Проводится поиск стационарного сверхзвукового решения при $x > x_{\text{ОССЗ}}$.

Результаты численного моделирования

Химические превращения в работе моделировались 8 обратимыми стадиями (Таблица 1) [17]. По методике, представленной в [9], для химически равновесной смеси водород-воздух в рассмотренном контуре ($R_1/R_0 = 0,56$, $R_2/R_0 = 0,493$) может быть построена R - R диаграмма, согласно которой детонационная волна в данной задаче может находиться в части «d» рассматриваемого канала при входной скорости потока более 2200 м/с, в «b» и в «с» частях рассматриваемого канала при входной скорости потока более 2700 м/с (Рис. 5).

Таблица 1.

Реакция	A, моль, м ³ , с, К	n	E, К
$H_2 + M = H + H + M$	5,5 E18	-1	51987
$O_2 + M = O + O + M$	7,2 E18	-1	59340
$H_2O + M = OH + H + M$	5,2 E21	-1,5	59386
$OH + M = O + H + M$	8,5 E18	-1	50830
$H_2O + O = OH + OH$	5,8 E13	0	9059
$H_2O + H = OH + H_2$	8,4 E13	0	10116
$O_2 + H = OH + O$	2,2 E13	0	8455
$H_2 + O = OH + H$	7,5 E13	0	5586

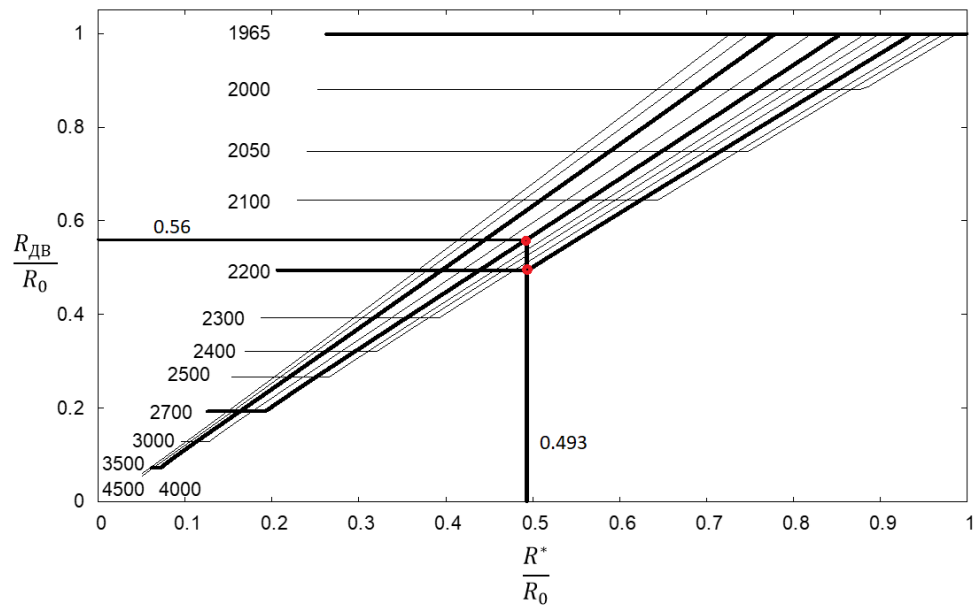
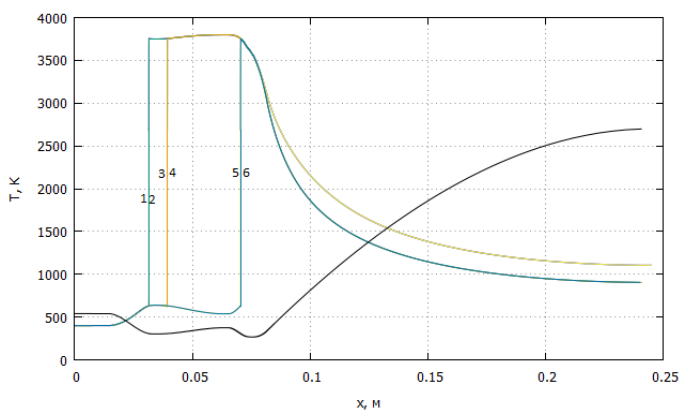


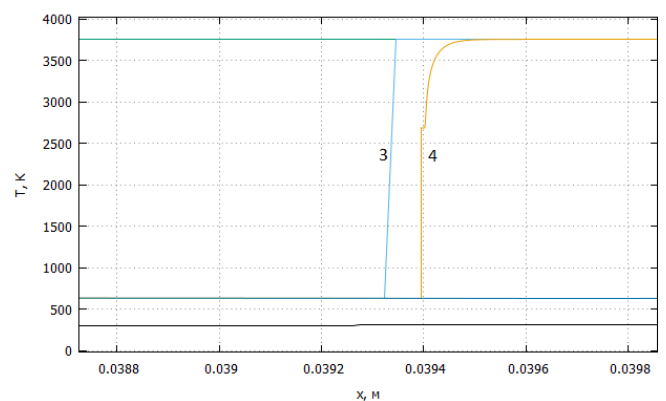
Рис. 5. RR -диаграмма для стехиометрической водородо-воздушной горючей смеси при $T_0 = 400$ К (равновесное сгорание).

Необходимо отметить, что стационарное решение зависит исключительно от соотношения радиусов канала в текущем и начальном сечениях. Таким образом, для рассматриваемой конфигурации канала возможно 3 стационарных решения с тремя различными положениями детонационной волны в рассматриваемом контуре.

При задании начальной скорости потока $v_0 = 2750$ м/с и начальной температуры $T_0 = 400$ К могут быть получены стационарные равновесные и неравновесные решения (рис. 6).



(a)



(б)

Рис. 6. Распределения температур в контуре для химически равновесной (1, 3, 5) и неравновесной (2, 4, 6) водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К, $v_0 = 2750$ м/с в рассматриваемом канале (а) и в области «с» (б) при наличии стационарной детонационной волны и перехода скорости потока через скорость звука.

При попытке получить стационарные неравновесные решения с начальной скоростью потока $v_0 = 2650$ м/с и начальной температурой $T_0 = 400$ К наблюдается наличие только одного вида решений с детонационной волной в «b» и в «с» частях рассматриваемого канала (только дозвуковые), что указывает на отсутствие решений с переходом скорости потока через скорость звука (рис. 7). При этом, стационарное неравновесное решение с переходом скорости потока через скорость звука при данных начальных скорости и температуре имеет место быть при наличии детонационной волны в «d» части рассматриваемого канала (рис. 8).

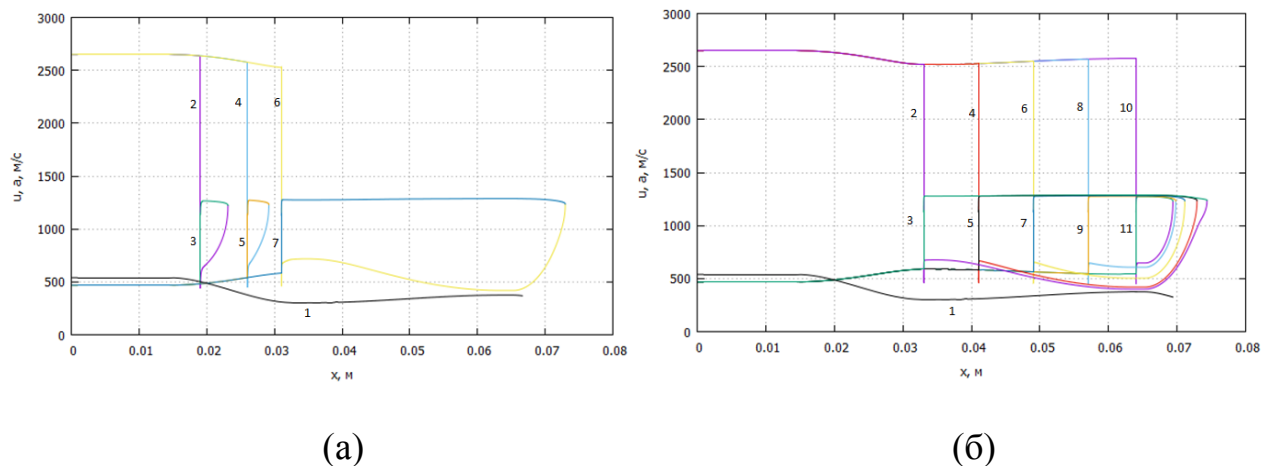


Рис. 7. Распределения скоростей потока и звука при различных положениях детонационной волны в части «b» (а) и «с» (б) контура для химически неравновесной водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К, $v_0 = 2650$ м/с. 1 – форма канала, 2, 4, 6, 8, 10 – скорости потока, 3, 5, 7, 9, 11 – скорости звука.

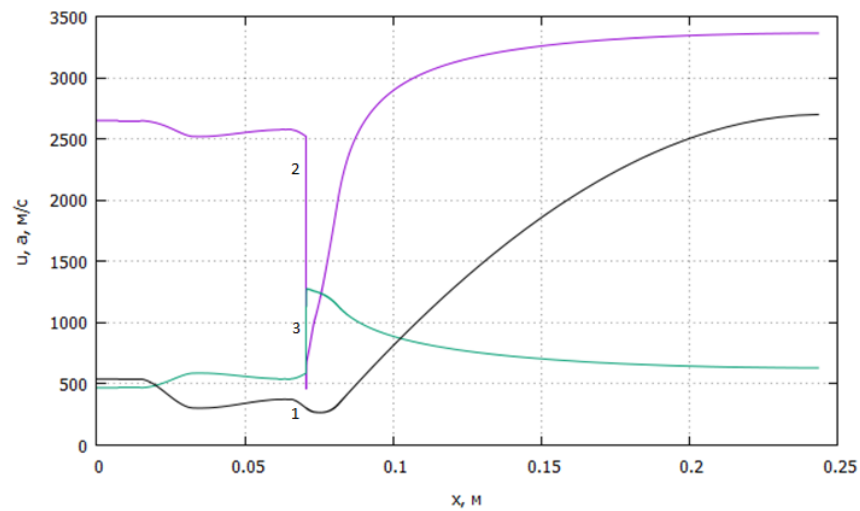


Рис. 8. Распределения скорости потока и звука при постановке детонационной волны в части «d» контура для химически неравновесной водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К, $v_0 = 2650$ м/с. 1 – форма канала, 2 – скорость потока, 3 – скорость звука.

Отметим, что факты наличия и отсутствия решений согласуются с результатами расчетов, представленными на $R-R$ диаграмме (рис. 5).

В [1-3] отмечено, что в нереагирующем потоке стационарная ударная волна является устойчивой в расширяющемся канале и неустойчивой в сужающемся. Взяв математическую модель нестационарного квазиодномерного течения в канале [10], реализовав схему Годунова С. К. [18-20] и задав в качестве начального распределения параметров результаты, полученные при предположении о равновесном протекании химических превращений в детонационной волне (рис. 6), можно наблюдать следующую эволюцию параметров течения. Распределение параметров стационарного решения с детонационной волной в области «b» является неустойчивым. Детонационная волна уходит из расчетной области, двигаясь против потока (рис. 9).

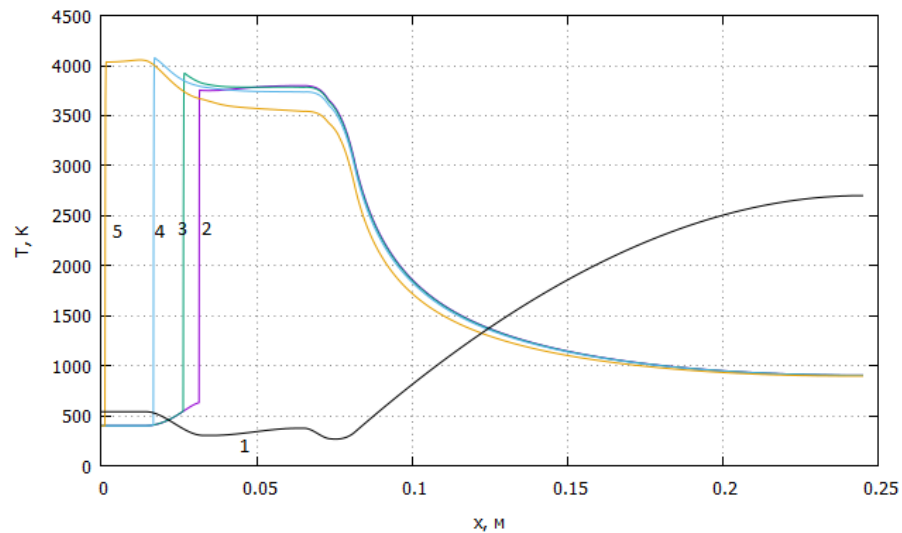


Рис. 9. Распределения температуры при постановке детонационной волны в части «b» контура для химически неравновесной водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К, $v_0 = 2750$ м/с. 1 – форма контура, 2 – начальное приближение, 3 – распределение температуры в момент времени $t=372$ мкс, 4 – распределение температуры в момент времени $t=418$ мкс, 5 – распределение температуры в момент времени $t=443$ мкс.

Неустойчивым является стационарное решение с детонационной волной в области «d». Детонационная волна, двигаясь против потока, устанавливается в области «с» (рис. 10) или, перемещаясь по потоку (рис. 11), покидает расчетную область.

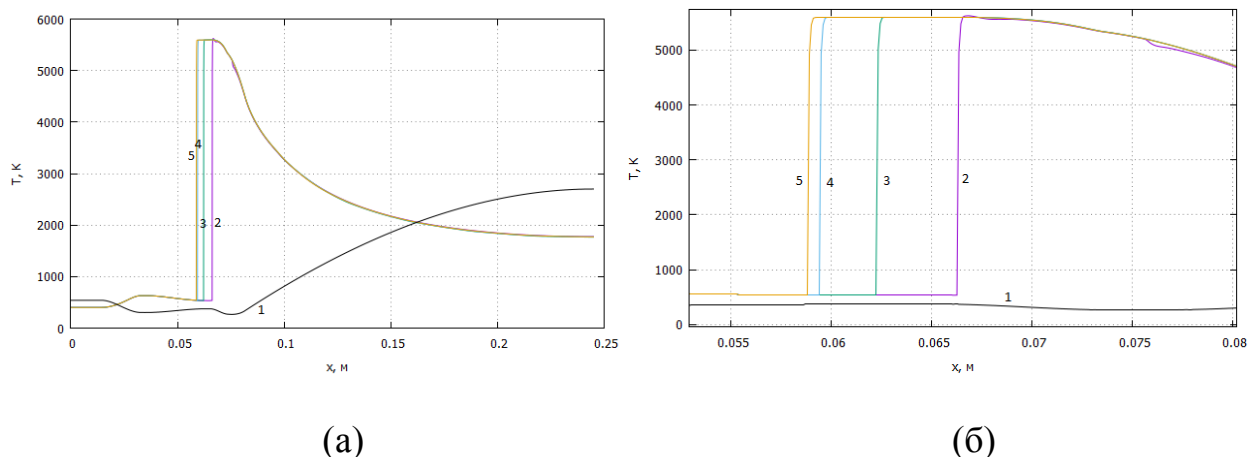


Рис. 10. Распределения температуры при постановке детонационной волны в части «d» контура для химически неравновесной водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К, $v_0 = 5000$ м/с, расчетная область целиком (а) и окрестность распространения детонационной волны (б). 1 – форма контура, 2 – начальное приближение, 3 – распределение температуры в момент времени $t=512$ мкс, 4 – распределение

температуры в момент времени $t=1025$ мкс, 5 – распределение температуры в момент времени $t=1571$ мкс.

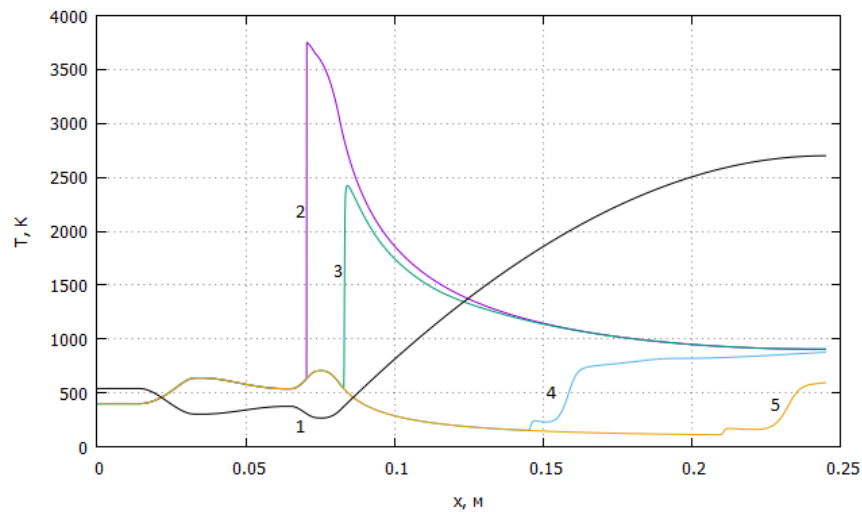


Рис. 11. Распределения температуры при постановке детонационной волны в части «d» контура для химически неравновесной водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К, $v_0 = 2750$ м/с. 1 – форма контура, 2 – начальное приближение, 3 – распределение температуры в момент времени $t=136$ мкс, 4 – распределение температуры в момент времени $t=168$ мкс, 5 – распределение температуры в момент времени $t=195$ мкс.

Стационарное решение с детонационной волной в области «с» является устойчивым (рис. 12). Детонационная волна из-за неравновесного протекания химических реакций смещается вправо.

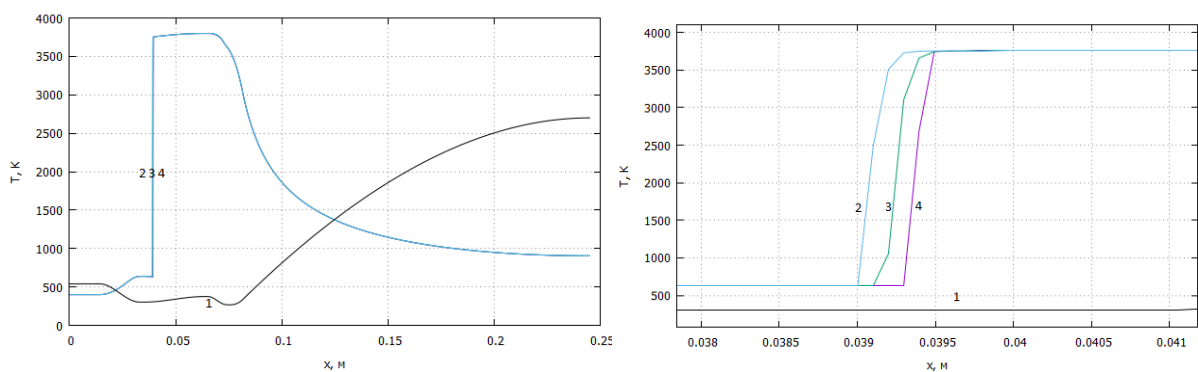


Рис. 12. Распределения температуры при постановке детонационной волны в части «с» контура для химически неравновесной водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К, $v_0 = 2750$ м/с. 1 – форма контура, 2 – начальное приближение, 3 – распределение температуры в момент времени $t=136$ мкс, 4 – распределение температуры в моменты времени $t=289$ мкс и $t=2888$ мкс.

При реализации алгоритма прохождения особой точки можно варьировать скорость потока на входе в канал, считая, что координата стационарной детонационной волны фиксирована. В этом случае путем задания координат детонационных волн на границах сужающихся и расширяющихся областей рассматриваемого канала могут быть получены диапазоны скоростей, при которых реализуется неравновесное течение со стоячей детонационной волной (рис. 13). Так, в рассматриваемом контуре в области «с» возможно стационарное решение при начальной скорости потока от 2680 до 5250 м/с.

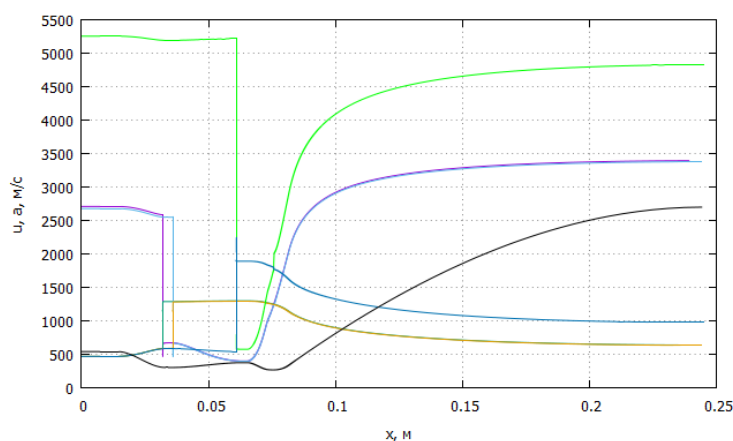


Рис. 13. Диапазон скоростей потока стационарных неравновесных квазиномерных решений с переходом скорости потока через скорость звука.

Необходимо отметить, что явление детонации представляет собой сложный, многофакторный и многомерный процесс. Используемая в настоящей работе постановка задачи может быть использована только для первоначального анализа течения, а также в качестве начальных данных для проведения многомерных расчетов.

Выводы

В работе исследовано квазиодномерное стационарное химически неравновесное течение потока горючей водородо-воздушной смеси в канале переменного сечения со сгоранием топлива в стоячей детонационной волне с переходом скорости потока через скорость звука. Проведено сравнение полученных результатов с аналогичными решениями для случая химически равновесной смеси. Рассмотрены алгоритмы получения стационарного решения путем варьирования продольной координаты постановки детонационной волны и методом варьирования начальной скорости потока. Проведен численный анализ устойчивости по времени полученных решений.

Библиографический список

1. Черный Г.Г. Газовая динамика. - М.: Наука, 1988. - 424 с.
2. Крайко А.Н., Широнос В.А. Исследование устойчивости течения в канале с замыкающим скачком уплотнения при околосвуковой скорости потока // Прикладная математика и механика. 1976. Т. 40. С. 579 - 586.
3. Гринь В.Т., Крайко А.Н., Тилляева Н.И., Широнос В.А. Анализ устойчивости одномерного течения в канале при произвольном изменении параметров стационарного потока между сечением замыкающего скачка и выходом из канала // Прикладная математика и механика. 1977. Т. 41. С. 637 - 645.
4. Борисов А.Д. Исследование влияния способа подачи струй в камеру на эффективность смешения и горения топливо-воздушной смеси // Труды МАИ. 2017. № 90. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=74721>

5. Ананьев А.В., Борисов Д.М., Васютичев А.С. Гидаспов В.Ю., Дегтярев С.А., Лаптев И.В., Руденко А.М. Численное моделирование пространственных смешанных двухфазных течений с химическими превращениями применительно к воздушно-реактивным двигателям // Вестник Московского авиационного института. 2009. Т. 16. № 2. С. 131 - 140.
6. Ребров С.Г., Голиков А.Н., Голубев В.А., Молчанов А.М., Яхина Г.Р. Численное моделирование процесса смесеобразования в модельной камере сгорания с лазерным зажиганием при работе на компонентах кислород-водород, кислород-метан // Труды МАИ. 2013. № 69. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=43154>
7. Liu J.-J. A thermodynamic analysis of quasi-one-dimensional self-sustaining gaseous detonation waves // Proceedings of the Royal Society A. Mathematical, physical & engineering sciences, 1999, available at: <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1999.0426>
8. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С. Об устойчивости детонационной волны в канале переменного сечения при сверхзвуковом входном и выходном потоках // XXI международная конференция по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2019): материалы конференции. (Алушта, 24-31 мая 2019). - М.: Изд-во МАИ, 2019. С. 438 - 440.
9. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование одномерного стационарного равновесного течения в детонационном двигателе // Труды МАИ. 2015. № 83. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=61826>

10. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование химически неравновесного течения в сопле жидкостного ракетного двигателя // Вестник Московского авиационного института. 2013. Т. 20. № 2. С. 90 - 97.
11. Sharpe G. J. The effect of curvature on detonation waves in Type Ia supernovae // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 2001, vol. 322, pp. 614 - 624.
12. Крюков В.Г., Абдуллин А.Л., Демин А.В., Сафиуллин И.И. Сравнение явных и неявных разностных схем расчета химически неравновесных процессов в соплах // Труды МАИ. 2017. № 92. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=76848>
13. Крюков В.Г., Абдуллин А.Л., Никандрова М.В., Исхакова Р.Л. Сокращение механизмов реакций при моделировании высокотемпературных течений в соплах // Труды МАИ. 2019. № 105. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=104166>
14. Radenac E. Fluctuating energy balance method for postprocessing multiphase flow computations // Journal of propulsion and power, 2013, vol. 29, no. 3, pp. 699 – 708.
15. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное издание в 4-х т. - М.: Наука, 1978. Т. 1. Кн. 2. - 328 с.
16. Sardeshmukh S., Heister S., Xia G., Merkle C., Sankaran V. Kinetic Modeling of Hypersonic Propellants Using Impinging Element Injectors // 48th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, 2012, <https://doi.org/10.2514/6.2012-3760>
17. Гардинер У., Диксон-Льюис Г. и др. Химия горения. - М.: Мир, 1988. - 464 с.

18. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П.

Численное решение многомерных задач газовой динамики. - М.: Наука, 1976. - 400 с.

19. Левин В.А., Мануйлович И.С., Марков В.В. Стабилизация волны детонации в сверхзвуковом потоке // Вестник Московского университета. Серия 1: Математика. Механика. 2011. № 4. С. 28 - 33.

20. Deiterding R. High-resolution numerical simulation and analysis of Mach reflection structures in detonation waves in low-pressure H₂-O₂-Ar mixtures: a summary of results obtained with the adaptive mesh refinement framework AMROC // Journal of Combustion, 2011, doi:10.1155/2011/738969