

DOI: 10.51790/2712-9942-2024-5-4-07

РАСЧЕТ ИНИЦИИ ГОРЕНИЯ В ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ КАНАЛАХ НА ОСНОВЕ КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ МНОГОСТАДИЙНОЙ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ ВОДОРОДО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ

С. Н. Мартюшов^а, Т. М. Рыжова^б

Московский авиационный институт — Национальный исследовательский университет, г. Москва, Российская Федерация

^а ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-8591-1377>, ✉ martyush@mai.ru

^б ryzhovatanyam@gmail.com

Аннотация: многочисленные исследования посвящены воспламенению водородо-воздушной смеси и переходу горения в детонацию. Преимущество водорода как моторного топлива заключается в детонационном топливном цикле, более энергетически выгодном, по сравнению с обычным топливным циклом. В связи с этим задача конструирования водородного детонационного двигателя является крайне актуальной. В лабораторных экспериментах воспламенение водорода наблюдается инициацией электрическим разрядом или как результат сжатия в каналах с сужениями. Большое число работ посвящено численному моделированию течений реагирующих смесей в каналах с сужениями, а также инициации воспламенения при возникновении горячего пятна (как модели электрического разряда). В настоящей работе проведена модификация алгоритма, предложенного автором ранее для расчета инициации горения водородо-воздушных газовых смесей, заключающаяся в использовании строго противопоточного варианта разностной схемы Чакраварти–Ошера, позволившей устранить в расчетах осцилляции концентраций компонент смеси. По этой модификации разностного алгоритма проведены расчеты воспламенения водородо-воздушных смесей в каналах с сужениями и угловыми точками, в окрестности которых происходит инициация горения. Для расчета уравнений кинетики использовались два алгоритма, основанные: первый — на решении полной системы уравнений кинетики и второй — на теории ветвящихся цепных реакций Н. Н. Семенова. Проведенные расчеты демонстрируют пригодность алгоритма ветвящихся цепных реакций для расчета задач инициации горения и детонации водородо-воздушных смесей в полной постановке многостадийных химических реакций.

Ключевые слова: период индукции при инициации воспламенения, переход от дефлаграции к детонации, жесткие системы дифференциальных уравнений, ветвящиеся цепные реакции.

Для цитирования: Мартюшов С. Н., Рыжова Т. М. Расчет инициации горения в осесимметричных каналах на основе кинетической модели многостадийной химической реакции водородо-воздушной смеси. *Успехи кибернетики*. 2024;5(4):51–58. DOI: 10.51790/2712-9942-2024-5-4-07.

Поступила в редакцию: 30.09.2024.

В окончательном варианте: 23.10.2024.

SIMULATION OF DEFLAGRATION-TO-DETONATION IN AXISYMMETRICAL CHANNELS USING A KINETICS MODEL OF THE MULTISTAGE HYDROGEN-AIR MIXTURE REACTION

S. N. Martyushov^а, T. M. Ryzhova^б

Moscow Aviation Institute – National Research University, Moscow, Russian Federation

^а ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-8591-1377>, ✉ martyush@mai.ru

^б ryzhovatanyam@gmail.com

Abstract: we investigated the deflagration-to-detonation process in hydrogen-air mixtures, a field extensively studied due to the energy-wise advantages of the detonation fuel cycle over conventional fuel cycles. Hydrogen's potential as a fuel has made the development of hydrogen detonation engines a highly relevant research problem. In lab experiments, deflagration typically initiates due to increases in energy and temperature, often triggered by successive electric discharges or interactions with obstacles in channels. Many studies have simulated the behavior of reacting gas flows in channels with obstacles or the initiation of deflagration via hot spots as analogs to electric discharges.

In this study, we modified an algorithm originally introduced by the author to calculate the initiation of deflagration in hydrogen-air mixtures. The modification involved implementing a strict counterflow version of the Chakravarthy-Osher difference scheme, which reduced oscillations in the mixture component concentrations. Using this modified algorithm, we simulated the initiation of deflagration of hydrogen-air mixtures in channels with obstacles.

For the simulation of the kinetic processes, we employed two algorithms to solve the system of kinetic equations. The first algorithm solves the full system of kinetic equations, while the second is based on the branching chain reaction theory proposed by N. Semenov. The results of these simulations demonstrate the reliability of the branching chain reaction algorithm for the simulation of deflagration in hydrogen-air mixtures, aligning well with the results obtained for the full multistage kinetic system.

Keywords: deflagration-to-detonation period; deflagration-to-detonation transition; system of stiff differential equations, branching chain reactions.

Cite this article: Martyushov S. N., Ryzhova T. M. Simulation of Deflagration-to-Detonation in Axisymmetrical Channels Using a Kinetics Model of the Multistage Hydrogen-Air Mixture Reaction. *Russian Journal of Cybernetics*. 2024;5(4):51–58. DOI: 10.51790/2712-9942-2024-5-4-07.

Original article submitted: 30.09.2024.

Revision submitted: 23.10.2024.

Введение

Исследованию течений с горением и детонацией смесей водорода с воздухом посвящено большое количество исследований. Это связано, в первую очередь, с энергетическим преимуществом детонационного топливного цикла перед циклом теплового сгорания и, в соответствии с этим, задачей конструирования детонационных двигателей, работающих на водородо-воздушной смеси. Среди перспективных результатов в конструировании водородного детонационного двигателя необходимо отметить: конструкцию импульсного детонационного двигателя, предложенную в [1] и заключающуюся в периодической фокусировке водородо-воздушной кольцевой струи в окрестности центра полусферы — резонатора, а также конструкцию ротационного детонационного двигателя, предложенную первоначально Войцеховским в [2], идея которой заключается в азимутальном движении детонационной волны внутри двух коаксиальных цилиндров с инъекцией водородо-воздушной смеси из кольцевого сопла в торцевой области. Развитие этой идеи для более сложных конфигураций содержится в работах Ждана с соавторами [3]. Одним из векторов продвижения в этом направлении является совершенствование математических моделей и численных методов для расчета процессов воспламенения газовой смеси и перехода первоначального горения в устойчивую детонацию. Первоначально для моделирования горения многими авторами (например, в работах Fujiwara с соавторами [4]) использовалась упрощенная модель Левина–Маркова [1]. В настоящее время для моделирования горения используется полная система уравнений кинетики, при этом для горения водорода существуют различные множества используемых реакций и коэффициентов в этих реакциях (см., например, Либерман [5], Денисов с соавторами [6] и т. д.). Процесс перехода медленного горения в быстрое горение и детонацию был первоначально описан в работе Семенова [7], и в настоящее время его теория ветвящейся цепной реакции считается в химической кинетике общепринятой. Для расчета концентрации радикалов (за исключением атомарного водорода) в этой теории используется метод квазистационарных концентраций (см., например, Денисов с соавторами [6]). Суть этого метода в том, что полагаются равными нулю скорости изменения концентрации радикалов. Сами концентрации в этом случае находятся из алгебраических соотношений по значениям концентраций остальных компонент. В настоящее время такой подход в численном моделировании течений с горением развивается, например, в работах Saeid с соавторами [8], Liu с соавторами [9]. В физическом эксперименте воспламенение смеси происходит либо при появлении теплового пятна (электрический разряд), либо вблизи геометрических особенностей области течения. В настоящей работе на основе модификации метода, предложенного в работе автора [10], исследуются течения реагирующей смеси в каналах с сужениями для установления устойчивых режимов воспламенения. Расчет газодинамических течений в окрестности угловых точек требует построения работоспособных расчетных сеток. В настоящей работе криволинейные структурированные расчетные сетки строились по программе автора [11], разработанной ранее на основе алгоритма Томпсона [12].

Методы

Используемая кинетическая модель и методы ее решения

Для моделирования реакций горения в смесях «водород–воздух» в настоящей работе используется как полная система обыкновенных дифференциальных уравнений, основанная на гипотезе Аррениуса о скоростях химических реакций, так и модель, основанная на теории ветвящихся цепных реакций [6, 7, 10], в которой расчет кинетики в «погранслое» сводится к отдельному от остальной си-

стемы решению двух дифференциальных уравнений для H и H_2O_2 . При этом для остальных радикалов используется метод квазистационарных концентраций (что отчасти снимает вопрос жесткости системы уравнений кинетики [13]). Уравнения, описывающие химические реакции, можно представить в виде:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_{ij} A_i = \sum_{i=1}^n \beta_{ij} B_i, \quad j = 1, \dots, M \quad (1)$$

где M, n – число реакций и компонент смеси соответственно, A_i, B_i – стехиометрические коэффициенты прямой и обратной реакций. Скорости изменения концентраций компонент смеси определяются в соответствии с гипотезой Аррениуса.

$$\dot{f}_i = \frac{dc_i}{dt} = \sum_{j=1}^M (\beta_{ij} - \alpha_{ij}) \omega_j(\vec{c}, T) \quad (2)$$

$$\omega_j(\vec{c}, T) = k_f(T) \prod_{i=1}^n c_i^{\alpha_{ij}} - k_h(T) \prod_{i=1}^n c_i^{\beta_{ij}} \quad (3)$$

$$k_f = A_f T^l \exp(-E_f/RT). \quad (4)$$

Рассматривались следующие реакции для компонент смеси $H_2, O_2, H, O, H_2O, OH, HO_2, H_2O_2, N_2$ (k_i – скорости реакций).

Таблица 1

Химические реакции

$H_2 + O_2 - k_0 - 2OH$	$H_2 + OH - k_1 - H + H_2O$	$H + O_2 - k_2 - H + OH$
$H_2 + O - k_3 - H + OH$	$HO_2 + M - k_5 - H + O_2 + M$	$H + H_2O - k_6 - H_2 + OH$
$2H + M - k_7 - H_2 + M$	$2HO_2 - k_8 - H_2O_2 + O_2$	$H_2O_2 + M - k_9 - 2OH + M$
$2OH + M - k_{10} - H_2O_2 + M$	$H + H_2O_2 - k_{11} - OH + H_2O$	

Значения коэффициентов k_i в формулах (2)–(4) для реакций таблицы 1 выбирались из [14]. Система уравнений кинетики (2)–(4) решалась методом Гира [13] для набора реакций из таблицы 1.

Характерным свойством горения смеси $H - O_2$ является, наряду с медленным горением, появление режима моментального взрыва, который происходит после иногда длительного периода индукции. В периоде индукции происходит накопление в смеси радикалов H, O, HO_2, H_2O_2, OH . Механизм взрыва – ветвящиеся цепные реакции радикалов – предложен Семеновым [7]. Для построения модели ветвящейся цепной реакции в настоящей работе использовалась схема цепной реакции, описанная в [10]. Содержание численного алгоритма, соответствующего этой схеме, заключается в следующем.

Концентрации атомарного водорода H и H_2O_2 находятся как решение системы двух дифференциальных уравнений:

$$d[H]/dt = 2 \cdot k_0 \cdot [H_2] \cdot [O_2] + \Phi \cdot [H] - k_7[H]^2, \quad (5)$$

где $\Phi = 2k_2 \cdot [O_2] - k_5 \cdot [O_2] - k_6 \cdot [H_2O] - k_{11}[H_2O_2]$.

$$d[H_2O_2]/dt = k_8 \cdot [HO_2]^2 - k_9[H_2O_2] \cdot [M] + k_{11} \cdot [OH]^2 \cdot [M] - k_9 \cdot [H_2O_2] \cdot [H]. \quad (6)$$

Коэффициенты $k_1 - k_{11}$ означают скорости реакций, указанных в таблице 1. Концентрации радикалов O, HO_2, OH считаются квазистационарными величинами (скорости их изменения полагаются равными нулю) и находятся из алгебраических соотношений по значениям концентраций «медленных переменных» H_2, O_2, H_2O , а также H, H_2O_2 .

$$[O] = [H] \cdot (k_2 \cdot [O_2]) / (k_3 \cdot [H_2]);$$

$$[OH] = (2 \cdot [O_2] \cdot [H_2] \cdot k_0 + k_6 \cdot [H_2O] \cdot [H] + 2k_9 \cdot [H_2O_2] \cdot [M] + k_{11} \cdot [H_2O_2] \cdot [H]) \cdot (k_1 \cdot [H_2] + 2k_{10}[M]); \quad (7)$$

$$[HO_2]^2 = k_5 \cdot [H] \cdot [O_2] \cdot [M] / (2k_8).$$

После этого концентрации H_2, O_2, H_2O находятся из решения оставшихся трех уравнений системы ОДУ (2). Дифференциальные уравнения (5), (6) с использованием скоростей реакции $k_1 - k_{11}$

при этом решаются с более мелким шагом по времени, так как скорости изменения концентраций H , H_2O_2 в соответствии с [7] существенно превышают скорости изменения «медленных» компонент H_2 , O_2 , H_2O .

Модель для расчета горения в течениях газовой динамики реагирующих смесей и методы ее расчета

Использовалась система уравнений газовой динамики, дополненная источниковыми членами, представляющими собой скорости изменения компонент газовой смеси, определяемых по (2)–(4). Газ предполагался невязким. Система уравнений для полной модели может быть представлена в следующей интегральной форме:

$$\frac{d}{dt} \int_V \vec{Q} dV + \oint_S \vec{n} F dS + \Phi = 0 \quad (8)$$

где $\vec{Q} = (\rho, \vec{m}, \rho e, \rho c_i)$, $i = 1, \dots, n$ – вектор консервативных переменных, $c_i = \rho_i/\rho$ – массовая доля компонент смеси, $\Phi = (0, 0, 0, 0, 0, \rho f_i)$ – источниковый член, $F = (\vec{m}, \vec{m} \cdot \vec{m}/\rho + PI, \vec{m}(e + p)/\rho, \vec{0})$ – вектор потоков, $P = \rho R_B T \sum_i \frac{c_i}{\mu_i}$, $e = R_B T \sum_i \frac{c_i}{\mu_i} / (\gamma - 1) + V^2/2 + \sum_i c_i h_i$ – давление и полная энергия единицы объема, $\sum_i c_i h_i$ – сумма произведений энтальпий образования на массовые концентрации компонент смеси.

Общим элементом конструирования современных разностных схем является переход к характеристическим переменным. Такой переход для системы (8), в которой в качестве неизвестных кроме газодинамических величин входят массовые концентрации компонент газовой смеси, имеет свои особенности и был проведен на основе модифицированного метода Roe–Pike’a (см., например, [15]) для произвольного числа компонент смеси [10]. Для численных расчетов применялась разностная схема Чакраварти–Ошера [16]. Модификацией алгоритма по сравнению с [10] являлся выбор чисто противоточного варианта этой схемы, что позволило устранить в решении осцилляции неизвестных, соответствующих концентрации компонент смеси.

Метод и примеры построения расчетных сеток

Рассматривались течения водородо-воздушных смесей, в которых инициация воспламенения возникает вблизи особых точек расчетной области (угловых и точек сужения), где необходимо производить сгущение расчетной сетки. В настоящей работе разностные сетки строились по алгоритму и программе автора [11], основанным на методе [12] как решение системы уравнений в частных производных параболического типа. На рисунке 1 приведены расчетные сетки для областей с такими особыми точками.

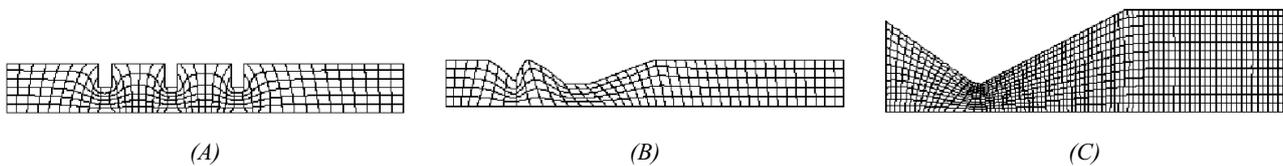


Рис. 1. (А)–(С) – расчетные сетки для областей с особыми точками, иницирующими воспламенение реагирующих газовых смесей (изображена каждая десятая координатная линия)

Результаты и обсуждение

Течение в неотражающем сопле. Осесимметрическая область в форме неотражающего сопла Лавая (расчетная сетка изображена на рис. 1 С) первоначально заполнена стехиометрической водородо-воздушной смесью с небольшой добавкой водяного пара (являющегося катализатором реакций 5 и 7 таблицы 1) при атмосферных значениях газодинамических параметров. В начальный момент слева инициируется ударная волна интенсивности $M_{\text{ударн. волны}} = 2.9$. При расчете в процессе продвижения ударной волны на верхней границе области, представляющей собой коническую поверхность, инициируется горение смеси. На рисунке 2 А–С приведены изолинии температуры и (в правом

столбце) соответствующие значения концентрации водяного пара, образующегося при воспламенении смеси. На рисунке 2 D приведены графики концентрации водяного пара в последовательные моменты времени вдоль верхней границы расчетной области.

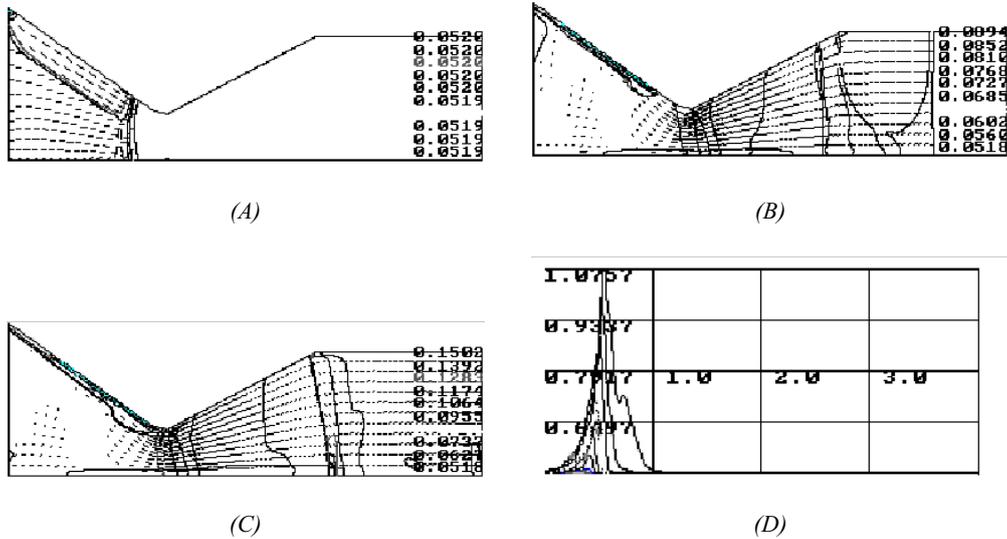


Рис. 2. A–C — изолинии температуры, D — графики концентрации водяного пара вдоль образующей верхней конической поверхности

Течение в сужающемся осесимметричном канале. Осесимметричная расчетная область представляет собой канал между конусом и цилиндром. Постановка задачи та же, что и в предыдущей задаче: ударная волна интенсивности $M_{\text{ударн. волны}} = 3.1$ распространяется с левой границы области. В этом случае нет определенной точки сжатия течения, сжатие происходит вдоль всей верхней границы области. На рисунке 3 A–B приведены изолинии температуры и (в правом столбце) соответствующие значения температуры, соответствующие воспламенению смеси. На рисунке 3 C приведены графики концентрации водяного пара в последовательные моменты времени вдоль верхней границы расчетной области, по горизонтальной оси откладывается соответствующий номер координатной линии по второму направлению.

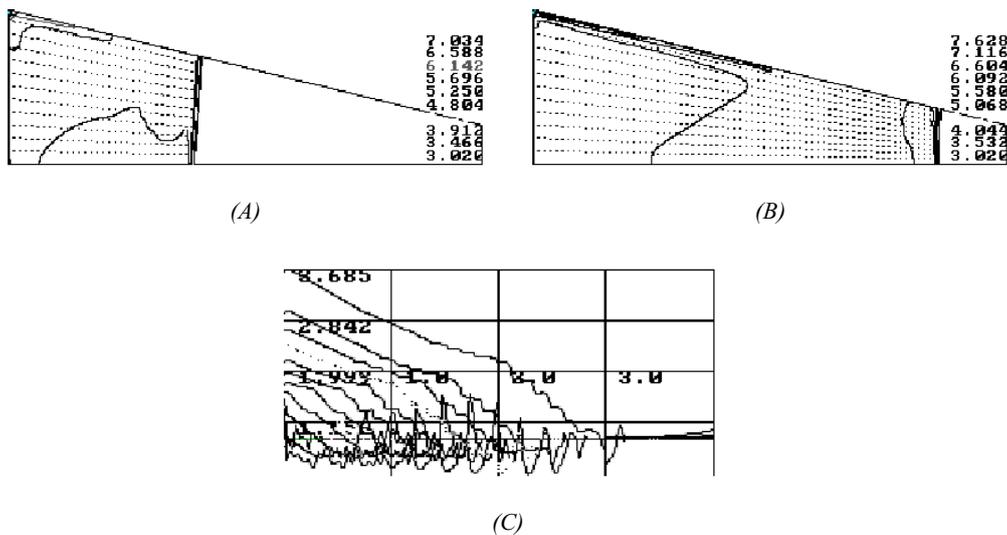
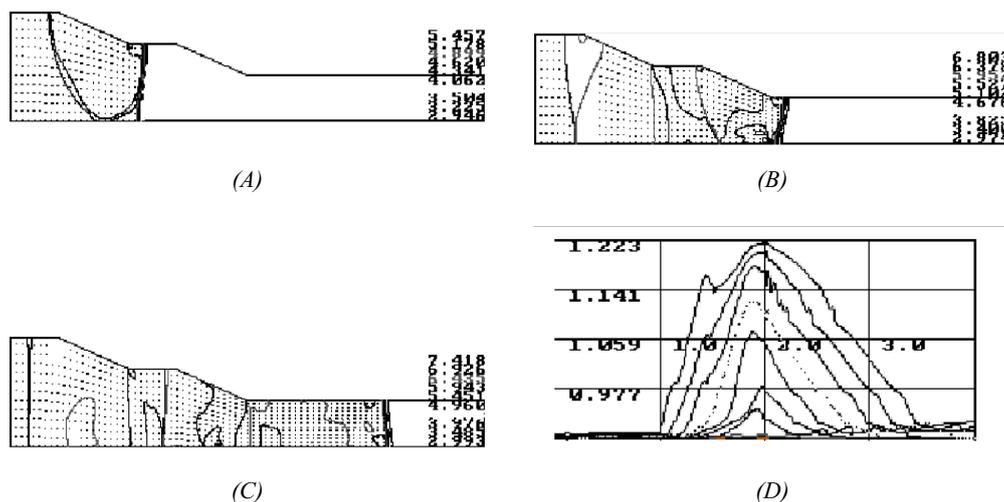


Рис. 3. A, B — изолинии температуры, C — графики концентрации водяного пара вдоль образующей верхней конической поверхности



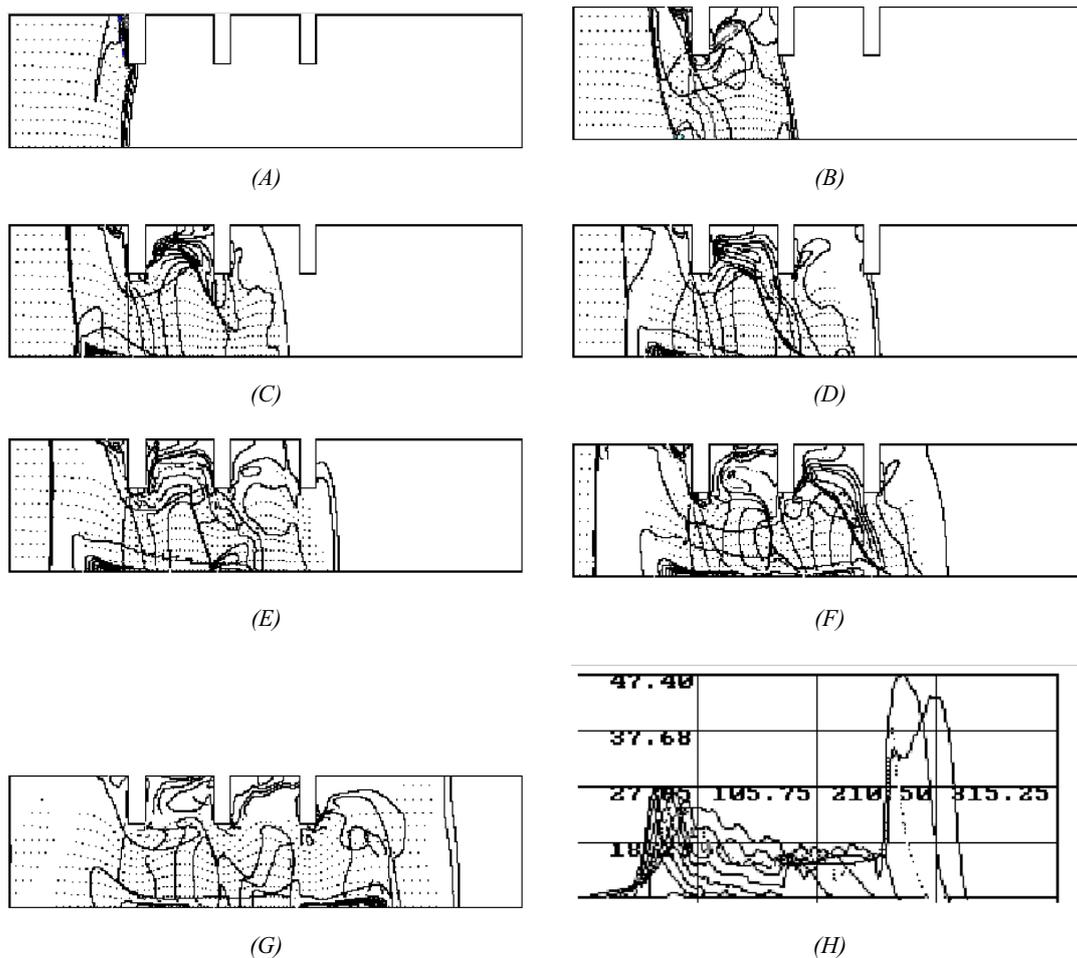


Рис. 5. А–Г – изолинии температуры и векторы скорости, Н – графики концентрации водяного пара вдоль оси симметрии цилиндра в последовательные моменты времени

ЛИТЕРАТУРА

1. Левин В. А., Нечаев Ю. Н., Тарасов А. И. *Контроль в процессах детонации*. Ред. Г. Рой. М.: Елех-КМ; 2000. С. 197–201.
2. Войцеховский Б. В. Стационарная детонация. *Доклады Академии наук*. 1959;129:1251–1256.
3. Zhdan S. A., Bykovskii F. A., Vedernikov F. F. Mathematical Modeling of a Rotating Detonation Wave in a Hydrogen-Oxygen Mixture. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. 2007;43:449–455.
4. Taki S., Fujiwara T. Numerical Analysis of Two-Dimensional Non Steady Detonations. *AIAA Journal*. 1978;16:73–78.
5. Liberman M. A. *Introduction to Physics and Chemistry of Combustion*. Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag; 2008. 534 p.
6. Денисов Е. Т., Саркисов О. М., Лихтенштейн Г. И. *Химическая кинетика*. М.: Химия; 2000. 568 с.
7. Семенов Н. Н. Самовоспламенение и цепные реакции. *Успехи химии*. 1967;36(1):3–22.
8. Saeid M. H., Khadem J., Emami S., Ghodrati M. Effect of Diffusion Time on the Mechanism of Deflagration to Detonation Transition in an Inhomogeneous Mixture of Hydrogen-Air. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2022;47(20):11052–67.
9. Liu D., Liu Z., Xiao H. Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Narrow Channels Filled with Stoichiometric Hydrogen-Air Mixture. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2022;47:11052–67.
10. Martyushov S. N. Numerical Simulation of Deflagration in Hydrogen-Air Gas Mixes. *Journal of Physics: Conference Series*. 2021;2124.
11. Martyushov S. N. Construction of Calculation Grids on the Basis of Poisson Equation Decision. *15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Appl. Maths. Proc.* Berlin; 1997. P. 191–195.

12. Thompson J. F., Varsi J., Mastin C. W. *Grid Generation: Foundations and Applications*. North-Holland; 1982. 658 p.
13. Холодов А. С., Лобанов А. И., Евдокимов А. В. *Разностные схемы для решения жестких обыкновенных дифференциальных уравнений в пространстве неопределенных коэффициентов*. М.: Изд-во МФТИ; 1991. 110 с.
14. Ibragimova L. B., Smechov G. D., Shatalov O. P. *Recommended Rate Constants of Chemical Reactions in an H₂-O₂ Gas Mixture with Electronically Excited Species O₂, O, OH Involved*. Moscow: Institute of Mechanics of Lomonosov Moscow State University; 2003. 25 p.
15. Roe P. L., Pike J. Efficient Construction and Utilisation of Approximate Riemann Solutions. *In Computing Methods in Applied Science and Engineering*. North-Holland; 1984.
16. Chakravarthy S. R., Osher S. Computing with High-resolution Upwind Schemes for Hyperbolic Equations. *Lectures in Applied Mathematics*. 1985;22(1):57–86.
17. Куликовский А. Г., Свешникова Е. И., Чугайнова А. П. *Математические методы изучения разрывных решений нелинейных гиперболических систем уравнений. Лекционные курсы НОЦ*. М.: МИАН; 2010. 145 с.