

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Сибирский государственный университет геосистем и технологий»
(СГУГиТ)

А. В. Троцюк, П. А. Фомин

**МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРЕГУЛЯРНЫХ И «ТОНКИХ»
ДЕТОНАЦИОННЫХ СТРУКТУР В БИНАРНЫХ
ГАЗОВЫХ СМЕСЯХ**

Монография

Новосибирск
СГУГиТ
2026

УДК 534.222.2:544.45

T764

Рецензенты: доктор физико-математических наук, в.н.с. Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН *Т. А. Хмель*
кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой физики СГУГиТ *И. Н. Карманов*

Троцюк, В. А.

T764 Моделирование нерегулярных и «тонких» детонационных структур в бинарных газовых смесях : монография : / А. В. Троцюк, П. А. Фомин. – Новосибирск : СГУГиТ, 2026. – 160 с. – Текст : непосредственный.

ISBN 978-5-907998-56-8

Монография подготовлена к.ф.-м.н., заведующим лабораторией газовой детонации Института гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН (ИГиЛ СО РАН) А. В. Троцюком и д.ф.-м.н., профессором кафедры специальных устройств, инноватики и метрологии СГУГиТ, старшим научным сотрудником ИГиЛ СО РАН П. А. Фоминым. В монографии предложены обобщенные модели химической кинетики и представлены результаты численного моделирования параметров, многофронтной и «тонкой» структуры детонационных волн в двухтопливных газовых смесях.

Моделирование детонации в смесях метана с водородом выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по Программе фундаментальных исследований РФ, проект 2.3.1.2.4. «Неклассические процессы горения и детонации как основа новых фундаментальных знаний и технологий» ИГиЛ СО РАН.

Монография может быть полезной специалистам в области газовой детонации и использоваться обучающимися по специальности 17.05.01 Боеприпасы и взрыватели (уровень специалитета).

Рекомендовано к изданию кафедрой специальных устройств, инноватики и метрологии, Ученым советом Института оптики и технологий информационной безопасности СГУГиТ.

Печатается по решению редакционно-издательского совета СГУГиТ

УДК 534.222.2:544.45

ISBN 978-5-907998-56-8

© СГУГиТ, 2026

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	5
1. Моделирование ячеистой детаноционной структуры в бинарной метано-водородной смеси.....	13
1.1 Введение	13
1.2 Обобщенная модель кинетики.....	18
1.3. Алгоритм численного двумерного расчета.....	33
1.4. Результаты расчетов и обсуждение	37
1.5 «Тонкая» структура переднего фронта детонационной волны	50
1.6. «Тонкая» структура основной поперечной волны.....	54
2. Моделирование детонации в стехиометрической бинарной смеси СО/Н ₂ /окислитель	64
2.1. Введение	64
2.2. Обобщенная модель кинетики детонационного горения синтез-газа	66
2.3. Результаты расчетов и обсуждение. «Тонкая» структура поперечной волны.....	73
3. Study of the detonation cellular structure in a methane–hydrogen dual-fuel mixture	83
3.1. Introduction.....	83
3.2. Generalized detonation kinetics model for a methane-hydrogen dual-fuel mixture.....	87
3.3. Governing equations and numerical algorithm	95
3.4. Two-dimensional numerical simulation and discussion	97
3.5. «Fine» structure of the leading edge of the detonation wave.....	107
3.6. «Fine» structure of the primary transverse wave	112
3.7. Conclusions and acknowledgements.....	115

4. Моделирование вращающейся детонационной волны в синтез-газе	117
5. Детонационная кинетика силана и перекиси водорода. Примеры моделирования детонационных течений	126
5.1. Обобщенная модель кинетики для силано-воздушной смеси	126
5.2. Моделирование бифуркационной ячеистой структуры в бинарной смеси $\text{H}_2\text{-H}_2\text{O}_2$ с O_2 и N_2	132
5.3. Примеры моделирования детонационных течений	135
Заключение.....	141
Библиографический список.....	143

ВВЕДЕНИЕ

Катастрофические утечки горючих газов и жидкостей в быту, на производстве и при транспортировке, нерасчетные режимы работы химических реакторов могут сопровождаться газовой детонацией с соответствующими жертвами и материальным ущербом.

Область технологического применения газовой детонации достаточно широка и непрерывно расширяется. Для примера можно привести технологию детонационно-газового нанесения порошковых покрытий и ракетные двигатели на пульсирующей и непрерывной детонации. В последнее время предложены технологии детонационной утилизации бытовых и производственных отходов ультраперегретым паром и получения металлических порошков ударно-волновым воздействием продуктов газовой детонации на струю расплавленного металла. И этот список может быть значительно расширен.

Имеется подтвержденная экспериментами и расчетами точка зрения на природу широко известного Тунгусского метеорита, согласно которой данный феномен представлял собой крупнейший в истории человечества взрыв природной объемно-детонирующей системы (детонацию метано-воздушного облака газогидратной природы, инициированной метеоритом). В ряде работ природа серебристых облаков, озонного слоя и озонных «дыр», также связывается с цепным воспламенением и горением водорода в Атмосфере, т.е. с процессами, лежащими в основе и газовой детонации.

Таким образом, решение широкого диапазона задач обеспечения взрывобезопасности, понимания природы многих природных явлений и

развития ряда взрывных технологий невозможно без изучения газовой детонации, в том числе и развития ее теории.

Известно, что траектории движения локальных областей высокого давления на лидирующем ударном фронте детонационной волны формируют ячеистую ромбовидную структуру.

Размер детонационных ячеек во многом определяет режим распространения детонационной волны (многофронтный, спиновый, галлопирующий), геометрические и концентрационные пределы ее существования. От него зависит критическая энергия прямого инициирования детонации (электрической искрой, сфокусированным излучением лазера, взрывом заряда конденсированного взрывчатого вещества), возможность, целесообразность и эффективность технического применения газовой детонации в технике и технологиях.

Можно с уверенностью утверждать, что без опыта численного моделирования ячеистых структур газовой детонации невозможно или проблематично решать более сложные задачи распространения детонационных волн в рамках решения научных и практических задач.

Авторы настоящей Монографии имеют большой опыт численного моделирования газовой детонации. Сделан расчет регулярных и нерегулярных ячеек в плоских каналах. Рассмотрен ряд одно- и двухтопливных смесей, интересных с точки зрения технического использования детонационных волн. Рассчитан процесс «размножения» детонационных ячеек в расширяющейся детонационной волне. Изучен механизм неавтомоделного маховского отражения детонационных волн от клина. Выполнено численное моделирование двухразмерных бифуркационных ячеек. Рассчитаны параметры и структуры потока в прямоточном детонационном двигателе и в двигателе на вращающейся детонации.

Численные расчеты многофронтной газовой детонации чрезвычайно сложны. Необходимо совместно решать неоднородные нестационарные

уравнения, описывающие динамику сплошной среды с учетом возможных внешних воздействий, и уравнения химической кинетики в условиях нестационарного многофронтного потока с большими пространственными и временными градиентами, в том числе в пространстве сложной геометрии.

Один из основных подходов в описании химических превращений состоит в использовании детальной кинетики, которая позволяет рассчитать химический состав смеси и на этой основе определить входящие в уравнения движения газа молярную массу и внутреннюю энергию смеси. Использование детальных кинетических схем, как правило, затрудняется сложностью реакционного механизма и наличием большого набора констант, которые не всегда известны. Во многих случаях это дополняется необходимостью выполнения огромного объема численных вычислений, что далеко не всегда посилено даже для современного уровня развития быстродействующей вычислительной техники.

В этой связи для численного моделирования газовой детонации широко используются обобщенные модели кинетики и химического равновесия. Они не требуют расчета детального химического состава смеси, что существенно упрощает описание химических превращений. С другой стороны, обобщенные модели, как правило, обладают рядом принципиальных недостатков, которые связаны с физически необоснованными и противоречивыми предположениями и не полным соответствием основным физическим принципам. Зачастую это приводит не только к количественным, но и к качественным ошибкам в расчетах параметров и структуры детонационной волны.

Детальная и обобщенная кинетики находятся в достаточно сложном соответствии между собой. Как правило, первый вопрос, который возникает при оценке новой обобщенной кинетической модели, состоит в том, насколько хорошо она соответствует детальной кинетике, ко-

торая, априори, считается более точной и физически обоснованной. А ведь такой вопрос далеко не всегда правомерен! Это связано с тем, что детальная кинетика не верифицирована на численном моделировании многофронтной детонационной волны, и, соответственно, не может служить мерилom адекватности обобщенных кинетических моделей.

Авторами Монографии предложена широкая линейка физически обоснованных, высокоточных и простых обобщенных кинетических моделей для химических превращений в волне газовой детонации. Они являются определенной альтернативой детальной кинетике, использование которой, как отмечено выше, не всегда возможно. Модели широко и успешно апробированы в России и ряде других стран для решения широкого круга научных и технологических задач. Многочисленные примеры их использования в рамках исследования широкого диапазона детонационных потоков приведены в настоящей Монографии.

За последние несколько лет особое научное и практическое значение приобрели исследования детонации двухтопливных газовых смесей углеводородов (окиси углерода, метана, керосина, гексана) с водородом. То есть бинарных смесей двух горючих с принципиально разными детонационными свойствами. Во-первых, это связано с перспективами их технического использования. Например, в реактивных двигателях на вращающейся и пульсирующей детонации, установках по утилизации органических отходов детонационными продуктами, и оборудовании для детонационного напыления. Во-вторых, в результате смешения имеет место своего рода синергия. Образуется химическая компонента, которая обладает оптимальным для технических приложений набором детонационных свойств, не встречающимся у каждой отдельной горючей компоненты по отдельности. Например, даже относительно небольшие добавки водорода приводят к резкому росту детонационной чувствительности смеси и расширению возможности ее технического использования в детонационных устройствах. Таким образом, добавление водо-

рода служит эффективным инструментом управления и контроля соответствующих детонационных процессов.

Силан – широко используемый в фотоэлектрической и полупроводниковой промышленности газ. Причем он чрезвычайно взрывоопасен и его взрывное поведение отличается крайней непредсказуемостью. Разработанные в Монографии подходы к описанию детонационной кинетики могут быть полезны на долгом пути поиска способов предотвращения и минимизации последствий сгорания в силана в детонационном режиме при его аварийных утечках в атмосферу.

Детонация является самоорганизующимся волновым процессом с химическими превращениями. Ее внутренняя структура подстраивается под внешние условия и вид среды, в которой она распространяется. Многофронтная детонационная волна включает передний ударный фронт и систему поперечных волн,двигающихся за ним. В свою очередь, и сам передний фронт, и сопровождающие его поперечные волны могут иметь более мелкие, так называемые «тонкие» структуры. Образно говоря, детонационная структура представляет собой матрешку, в которой «внутри» более крупных по масштабу структур находятся более мелкие. И «тонкой» структуре переднего фронта ДВ, и «тонкой» структуре поперечных волн посвящено очень небольшое число работ. Соответственно, есть проблемы в понимании их природы и влияния на технические приложения газовой детонации. Этим и объясняется интерес авторов Монографии, проявленный к моделированию таких структур.

В настоящей Монографии представлены результаты численного моделирования газовой детонации в широком диапазоне одно- и многотопливных газовых смесей, выполненных с единых позиций описания химических превращений и динамики детонационных волн. Расчет непрерывной вращающейся детонационной волны в камере сгорания представляет

собой впечатляющий практический пример использования проведенных теоретических исследований.

Монография состоит из следующих взаимосвязанных частей.

Первая глава. Предложена обобщенная модель детонационной кинетики в бинарной метано-водородной смеси. По набору своих свойств (физической обоснованности, эффективности и точности) она не имеет аналогов. Модель представляет собой эффективный инструмент для описания химических превращений при решении научных и прикладных задач, связанных с детонацией в газовых, газожидкостных и газопылевых смесях.

Достоинства модели продемонстрированы в рамках численного моделирования ячеистых детонационных структур во всем диапазоне соотношений между горючими. Получены принципиально новые результаты по перестройке многофронтной структуры от нерегулярной к регулярной. Получены «тонкие» структуры лидирующего ударного скачка и следующих за ним поперечных волн.

Вторая глава посвящена численному моделированию детонационной волны в плоском канале, заполненном стехиометрической смесью синтез-газа с воздухом. Для описания химических превращений предложена обобщенная кинетическая модель. Подобного рода расчеты ранее не производились. Представлен ряд новых результатов по структуре детонационной волны.

Третья глава написана на английском языке для увеличения числа потенциальных читателей Монографии и подтверждения российского приоритета в рассматриваемых вопросах. В ней изложена обобщенная кинетическая модель и результаты численного моделирования детонации в бинарной метано-водородной смеси.

В четвертой главе представлены результаты численных экспериментов направленных на решение вопроса о возможности сжигания смеси синтез-газа с воздухом в режиме непрерывной вращающейся детонации в цилиндрической детонационной камере. Представлен большой массив

результатов расчетов детонационных режимов для различных комбинаций основных определяющих параметров детонационного процесса. Нарботки по обобщенной детонационной кинетике и моделированию детонации в прямых каналах, изложенные в главе 2, использованы при расчете вращающейся детонации в полной мере.

В пятой главе основным объектом исследования была силано-воздушная смесь. Представлены результаты обобщенного моделирования детонационной кинетики и расчета структуры детонационной волны. Изложение дополнено результатами численного моделирования бифуркационных (двухразмерных) детонационных структур в бинарной смеси водорода с перекисью водорода, кислородом и азотом. Подобного рода задачи актуальны для взрывобезопасности атомных станций. Изложение дополнено примерами принадлежащих авторам оригинальных исследований классических задач газовой детонации, в которых использована обобщенная модель кинетики. Они имеют и научное, и прикладное значение. К ним относятся задачи о распространении волны по смесям с пространственным градиентом химического состава, отражения волны от клина, расширения фронта волны в пространстве и распространения волны в сверхзвуковых потоках реагирующего газа.

Настоящая монография может быть полезна научным работникам и инженерам при решении проблем взрывобезопасности промышленных и гражданских объектов, газопроводов и транспортных систем, а также технического использования газовой детонации в ракетостроении, машиностроении и защите окружающей среды.

Настоящая Монография является логическим продолжением Монографии П. А. Фомина и А. В. Троцюка «Моделирование кинетики детонационных процессов в газовых смесях», изданной в СГУГиТ в 2022 году и посвященной моделированию детонации однотопливных газовых смесей.

В заключение авторы выражают признательность д.ф.-м.н., профессору Анатолию Александровичу Васильеву за многолетнее и плодотворное научное сотрудничество в рамках моделирования газовой детонации.

Моделирование детонации в смесях метана с водородом выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по Программе фундаментальных исследований РФ, проект 2.3.1.2.4. «Неклассические процессы горения и детонации как основа новых фундаментальных знаний и технологий» ИГиЛ СО РАН.

1. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯЧЕИСТОЙ ДЕТОНАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ В БИНАРНОЙ МЕТАНО-ВОДОРОДНОЙ СМЕСИ

1.1 Введение

Бинарная метано-водородная смесь с точки зрения детонационной чувствительности есть комбинация трудно детонируемой метановой компоненты и легко инициируемого водорода, который играет роль промотора и служит инструментом управления параметрами и структурой ДВ. Одно из перспективных направлений применения рассматриваемой двухтопливной смеси – ракетные двигатели на непрерывной вращающейся детонации [1, 2]. При целом ряде достоинств метана как горючего (дешевизна при достаточно высоких параметрах и эффективности детонационного сжигания, сочетаемых с невысокой взрывоопасностью), он не может быть единственным горючим для непрерывного детонационного двигателя (для чего и нужен водород).

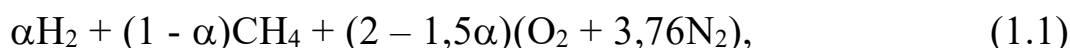
Волновая картина, возникающая в камере сгорания двигателя на вращающейся детонации, имеет весьма сложную структуру, отличающуюся от многофронтной ячеистой структуры ДВ в плоском канале. Тем не менее, моделирование ДВ в плоском канале позволяет отработать физико-математические модели и компьютерные коды, которые можно использовать при расчете параметров детонационных двигателей. Без такой научной предистории подобного рода расчеты вряд ли возможны. И одним из продуктов подобного рода расчетов является поперечный размер детонационной ячейки a_0 – один из важнейших параметров газовой детонации [3].

Оценка a_0 в бинарной метано-водородной смеси выполнена в [4], для чего использована явная алгебраическая формула Васильева-Николаева [3]. В нее входят скорость и величина периода индукции в пике Неймана волны Чепмена-Жуге. Соответственно, аррениусовская формула для расчета периода индукции полагается известной. К сожалению, численного исследования детонационных ячеистых структур в рассматриваемой смеси не сделано. Имеются лишь численные расчеты ДВ в однопаливных смесях $\text{CH}_4\text{-H}_2\text{-окислитель}$ (см., например, [5-7]). Это служит существенным сдерживающим фактором, затрудняющим как расчеты габаритов и рабочих режимов двигателя, как и разработку его цифрового двойника.

Численное моделирование газовой детонации невозможно без учета химических превращений. Они определяют тепловыделение, внутреннюю энергию, молярную массу и показатель адиабаты смеси. Детальная кинетика для описания химической реакции далеко не всегда подходит. Действительно, она характеризуется сложностью многостадийного реакционного механизма и требует порой непреодолимого объема численных вычислений. С этим напрямую связана и проблематичность верификации детальных кинетических механизмов и соответствующих констант на многомерных расчетах ДВ. Соответственно, разные детальные кинетические схемы, как правило, приводят к разным результатам расчетов структуры и размеров детонационной ячейки, которые сильно различаются и между собой, и с экспериментом. Поэтому, несмотря на некоторый рост числа работ, в которых задействована детальная кинетика (см., например, [8-11]), в подобного рода задачах широко используются и обобщенные модели кинетики (например, [5-7, 12-15]). Для их обозначения встречается термин «приведенные модели кинетики» и ряд других. В рамках подобного рода моделей для расчета молярной массы,

внутренней энергии (теплового эффекта химической реакции), показателя адиабаты и теплоемкостей смеси (или части из указанных величин), детальный химический состав смеси не требуется. Кинетические расчеты существенно упрощаются, объем численных вычислений становится относительно небольшим и появляется возможность осуществлять численное исследование газовой детонации до получения конечных результатов.

В настоящей Главе будет предложена обобщенная кинетическая модель детонационного сгорания стехиометрической бинарной метано-водородно-воздушной смеси:



$0 \leq \alpha \leq 1$. Она расширит область применения физически обоснованной и успешно верифицированной обобщенной модели кинетики для метана [6, 7] на стехиометрическую смесь $\text{CH}_4\text{-H}_2\text{-воздух}$. Предлагаемая модель для (1.1) будут обладать тем же набором достоинств, что и [6, 7]. Отметим, что (1.1) при $\alpha = 0$ и $\alpha = 1$ содержит только одно горючее, CH_4 или H_2 , соответственно.

Для верификации предлагаемой обобщенной модели и демонстрации ее возможностей будут выполнены численные двумерные расчеты ДВ в (1.1) внутри всего диапазона изменения соотношения между горючими компонентами. Без использования предлагаемой модели подобного рода расчеты были бы затруднительны. К настоящему времени выполнен большой объем измерений параметров и структуры ДВ в бинарной $\text{CH}_4\text{-H}_2$ смеси при различных α , давлениях и температурах [16-30]. Если по результатам расчета качественные особенности детонационной структуры и величины a_0 будут хорошо соответствовать эксперименту,

появятся основания полагать, что предлагаемая модель работоспособна в рамках численного моделирования детонационных двигателей и других сложных детонационных течений.

Ячеистая структура в стехиометрической метано-воздушной смеси сильно нерегулярна [6, 17–20]. Размер детонационных ячеек на поверхности следовых отпечатков меняется по пространству хаотичным образом. Структура ДВ включает пространственно несимметричные основные поперечные волны (ПВ), и совокупность уменьшающихся по амплитуде вторичных (третичных и т. д.) волн. Присутствуют и области непрореагировавшего газа. Степень нерегулярности ячеистой структуры при уменьшении α растет [17–19]. Отметим, что это качественная экспертная оценка, основанная на сравнении следовых отпечатков. Количественного критерия степени нерегулярности не выработано. Ячеистая структура ДВ в стехиометрической водородо-воздушной смеси близка к регулярной [17–19, 21]. Таким образом, изменение α в смеси (1) от 0 к 1 приводит к перестройке детонационной структуры. Исследование подобной эволюции представляет самостоятельный научный интерес. Соответствующая информация будет представлена в настоящей монографии на основании анализа результатов численных расчетов детонационных структур.

В экспериментах [31, 32] для ряда однотопливных смесей зафиксирована «тонкая» структура переднего фронта ДВ, то есть совокупность более мелких возмущений, чем основные ПВ (которые и формируют ячеистую структуру). Для одних смесей эти скачки являются ДВ, для других это ударные волны (УВ). В [32] предложен и эмпирический критерий существования «тонкой» структуры переднего фронта ДВ. Представляется интересным исследовать структуру переднего фронта ДВ в

рассматриваемой двухтопливной смеси на наличие рассматриваемой «тонкой» структуры и проверить применимость соответствующего критерия [32]. Подобное исследование будет выполнено в настоящей работе на основе результатов численных расчетов структуры ДВ.

В экспериментальных работах [33, 34] обнаружены «тонкие» структуры поперечной волны (ПВ) спиновой детонации в водородо-кислородной и метано-кислородной смесях соответственно. Этим термином называется наличие многофронтных (ячеистых) структур на ведущем (переднем) фронте основных ПВ. «Тонкая» структура ПВ получена и в численных расчетах ячеистой структуры ДВ в смеси одного горючего с окислителем (например в [6, 7] для метано-воздушной смеси). Расчеты двумерной структуры детонационной волны в двухтопливных газовых смесях и, в частности, исследования наличия «тонкой» структуры у ПВ на фронте ДВ, в такого рода смесях нет. Впервые подобного рода структура будет получена в настоящей работе для рассматриваемой метано-водородной смеси.

Суммируем цели работы: (i) разработка обобщенной модели химической кинетики для ДВ в стехиометрических двухтопливных метано-водородных смесях и (ii) численное моделирование ячеистой структуры детонационной волны в рассматриваемых смесях с целью верификации предложенной кинетической модели и исследования особенностей многофронтных детонационных структур («тонких» структур переднего фронта и поперечных волн, и эволюции нерегулярной ячеистой структуры при изменении соотношения между горючими).

1.2 Обобщенная модель кинетики

Физически обоснованная обобщенная двустадийная модель детонационной химической кинетики для CH_4 предложена в [6, 7]. Она является расширением модели кинетики [35] для H_2 . Модель [6, 7] (как и модель [35]) обладает уникальным набором свойств и исключительно эффективна в рамках численного моделирования многофронтной газовой детонации и ее приложений.

Сформулируем обобщенную модель химической кинетики детонационного горения бинарной смеси $\text{CH}_4\text{-H}_2$ (1.1). Для этого обобщим модель [6, 7] на (1.1). При $\alpha = 0$ предлагаемая модель будет совпадать с моделью [6, 7], а при $\alpha = 1$ – с моделью [35]. Ниже приводится лишь краткое изложение разработанной модели кинетики, поскольку ее отличие от модели [6,7] невелико, и приведены необходимые формулы для расчетов.

Химическая реакция полагается состоящей из двух принципиально различных между собой стадии: период индукции и основное тепловыделение. Газ термически идеален.

Период индукции при высоких давлениях и температурах измеряется в экспериментах за отраженными ударными волнами при постоянных в пространстве и во времени параметрах. По результатам таких экспериментов подбираются вид и константы аррениусовских формул для его расчета. В то же время, течение за фронтом ДВ характеризуется сильными пространственными и временными градиентами. Чтобы разрешить это противоречие, для расчета периода индукции τ_i за фронтом ДВ применяется следующий широко используемый алгоритм [3, 36]. Он позволяет учесть наличие пространственных градиентов параметров по-

тока и его общую или локальную нестационарность. В зоне индукции вычисляется параметр индукции Y :

$$Y(t) = \int_0^t \frac{dt}{\tau}, \quad Y(t=0)\tau = \tau(\rho, T) \quad (1.2)$$

где t – время, τ – период индукции при постоянных параметрах (плотности ρ и температуре T), $Y=0$. В момент окончания периода индукции $t = \tau_i$ и $Y(t = \tau_i) = 1$. В рамках предлагаемой кинетической модели будет применяться дифференциальный аналог этого условия. А именно, в систему двумерных уравнений Эйлера для сжимаемого газа добавляется дополнительное уравнение для Y :

$$\frac{\partial \rho Y}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Y}{\partial x} + \frac{\partial \rho v Y}{\partial y} = \frac{\rho}{\tau},$$

где u , v горизонтальная (по оси x) и вертикальная (по оси y) компоненты скорости потока, ρ - плотность, $Y=0$ при $t=0$. При $Y \geq 1$ период индукции полагается завершенным. Расчет молярной массы смеси μ в зоне основного тепловыделения производится интегрированием обыкновенного дифференциального кинетического уравнения.

Сложные химические процессы в индукционной зоне заменим некоторой брутто-реакцией, вид которой должен обеспечить выполнение следующих условий. (i) Тепло, выделяющееся в индукционной зоне, должно быть много меньше максимально возможного тепловыделения для данного химического состава смеси. (ii) К концу индукционного периода CH_4 полностью разлагается с образованием CO и OH . (iii) H_2 , входящий в начальную смесь, в брутто-реакции участия не принимает.

Предположение (iii) дополняет модель [6,7] для метана. Будут разными и формулы для расчета периода индукции. В остальном предлагаемая модель и [6,7] совпадают. Модель естественным образом трансформируется в [6,7], если начальная смесь не содержит H_2 ($\alpha = 0$).

Принимая во внимание условия (i)-(iii) полагаем, что брутто-реакция, в результате которой вместо метана появляются двухатомные компоненты, имеет вид: $CH_4 + O_2 \rightarrow CO + OH + 1,5H_2$. Пусть β - доля еще не прореагировавших в брутто-реакции молекул CH_4 , $\beta = 1$ при $Y = 0$ и $\beta = 0$ при $Y = 1$. Тогда химический состав смеси в индукционной зоне будет следующим:

$$(1-\alpha)\beta CH_4 + [(1-\alpha)\beta + 1 - 0,5\alpha]O_2 + (1-\alpha)(1-\beta)(CO + OH) + [1,5(1-\alpha)(1-\beta) + \alpha]H_2 + (2 - 1,5\alpha)3,76N_2 \quad (1.3)$$

В конце индукционной зоны химические превращения интенсифицируются. В связи с этим положим: $\beta = 1 - Y$. Формулы для Y и β позволяют рассчитать детальный химический состав смеси внутри зоны индукции. Следовательно, и вычислить μ , а также химическую часть внутренней энергии смеси по табличным значениям энтальпий образования отдельных компонент [37]. Отметим, что для расчета состава смеси в периоде индукции решения детальных кинетических уравнений не потребовалось.

Химическая часть внутренней энергии смеси U_{chem} в зоне индукции может быть рассчитана по соответствующим табличным значениям для отдельных компонент и их мольным долям, рассчитываемым по (1.3):

$$U_{chem} = \sum_i \delta_i U_{chem}^i,$$

где δ_i и U_{chem}^i - мольная доля и химическая часть внутренней энергии (энтальпия образования) i -го компонента из (3). Энтальпии образования Н, О, N₂ и СО полагаются нулевыми, химические части внутренней энергии молекул Н₂, О₂, ОН, и Н₂О равны соответствующим мольным энергиям диссоциации D_i с противоположным знаком, а $U_{chem}^{CH_4} = D_{CO} - D_{CH_4}$. Поэтому, в соответствии с (3), получим:

$$U_{chem} = [\delta_{CH_4}(D_{CO} - D_{CH_4}) - \delta_{H_2}D_{H_2} - \delta_{O_2}D_{O_2} - \delta_{OH}D_{OH} - \delta_{H_2O}D_{H_2O}] / \mu, \quad (1.4)$$

где $D_{H_2} = 432346$ Дж/моль = 103264 кал/моль, $D_{OH} = 424374$ Дж/моль = 101360 кал/моль, $D_{O_2} = 493929$ Дж/моль = 117973 кал/моль, $D_{H_2O} = 918421$ Дж/моль = 219361, $D_{CO} = 1070942$ Дж/моль = 255790 кал/моль, $D_{CH_4} = 1641720$ Дж/моль = 392118 кал/моль [37].

Полагается, что в зоне основного тепловыделения (и в химически равновесном состоянии) смесь состоит только из Н, О, ОН, Н₂, О₂, Н₂О, СО, СО₂, N₂. Но ее детальный химический состав в рамках модели не вычисляется, а μ определяется интегрированием обыкновенного дифференциального кинетического уравнения:

$$\frac{d\mu}{dt} = 4K_+ \frac{\rho^2}{\mu} \left(1 - \frac{\mu}{\mu_{max}}\right)^2 - AT^{3/4} (1 - e^{-\theta/T})^{3/2} \rho \left(\frac{\mu}{\mu_{min}} - 1\right) e^{-E/RT}, \quad (1.5)$$

при начальном условии $\mu = \mu_*$, где μ_* - молярная масса смеси в момент $t = \tau_i$. A , K_+ - обобщенные константы скоростей диссоциации и рекомбинации, θ - эффективная температура возбуждения колебательных степеней свободы молекул, R - универсальная газовая постоянная U_{chem} , μ_{min} $\Delta(\mu)$ и μ_{max} - молярные массы U_{chem} $\Delta(\mu)$ смеси в предельно диссо-

цированном и предельно рекомбинированном состояниях. Для вычисления U_{chem} используется следующая формула:

$$U_{chem}(\mu) = E\left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{min}}\right) + \Delta(\mu), \quad (1.6)$$

где E – средняя энергия диссоциации продуктов реакции, а поправка $\Delta(\mu)$ обеспечивает непрерывность вычисления на границе зоны индукции и зоны основного тепловыделения. В то же время присутствие является причиной неточности расчета. Величина равна:

$$\Delta(\mu) = [U_{chem}^* - E\left(\frac{1}{\mu_*} - \frac{1}{\mu_{min}}\right)] \cdot \psi(\mu), \quad (1.7)$$

где при $\mu_* \leq \mu \leq \mu_{CJ}$,

$$\psi(\mu) = \frac{\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{min}}}{\frac{1}{\mu_*} - \frac{1}{\mu_{min}}}$$

при

$$\mu_{min} \leq \mu < \mu_*, \psi(\mu) = \frac{\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{CJ}}}{\frac{1}{\mu_*} - \frac{1}{\mu_{CJ}}}$$

и

$\psi(\mu) = 0$ при $\mu > \mu_{CJ}$.

Здесь $\psi(\mu)$ - корректирующий множитель, μ_* и U_{chem}^* - молярная масса и химическая часть внутренней энергии смеси в конце зоны индукции (соответствуют химическому составу (1.3) при $\beta = 0$), μ_{CJ} - молярная масса смеси в точке Ч.-Ж. Множитель $\psi(\mu)$ введен для того, чтобы постепенно, по мере приближении μ к μ_{CJ} , уменьшить поправку $\Delta(\mu)$, приводящую к неточности вычисления U_{chem} в зоне основного тепловыделения, до нуля. Он уменьшает $\Delta(\mu)$ до нуля и при полной диссоциации смеси ($\mu = \mu_{min}$) в условиях сильного локального нагрева смеси в «горячих точках».

Максимальная относительная неточность в вычислении U_{chem} , связанная с Δ , равна:

$$\frac{\Delta}{E\left(\frac{1}{\mu_*} - \frac{1}{\mu_{min}}\right)}.$$

Она зависит от начального химического состава рассматриваемой двухтопливной смеси, но весьма мала (находится в диапазоне значений от 0,05 (при $\alpha = 1$) до 0,02 (при $\alpha = 0$)). Более того, подчеркнем, что согласно предлагаемой модели кинетики, данная неточность уменьшается до нуля при $\mu \rightarrow \mu_{CJ}$ и $\mu \rightarrow \mu_{min}$. Поэтому рассматриваемая неточность в вычислении не влияет на параметры Чепмена-Жуге и не может привести к каким-либо заметным искажениям в рассчитанных пространственных профилях параметров потока внутри зоны основного тепловыделения.

Термодинамическая часть внутренней энергии смеси $U_{therm}U_{chem}$ и в зоне индукции, и в зоне основного тепловыделения рассчитывается по формуле:

$$U_{therm}(T, \mu) = \left[\frac{3}{4} \left(\frac{\mu}{\mu_a} + 1 \right) + \frac{3}{2} \left(\frac{\mu}{\mu_a} - 1 \right) \frac{\theta / T}{\exp(\theta / T) - 1} \right] \frac{RT}{\mu}, \quad (1.8)$$

μ_a – молярная масса смеси в атомарном состоянии. Полная внутренняя энергия газа U есть сумма ее термодинамической и химической частей:

$$U(T, \mu) = U_{therm}(T, \mu) + U_{chem}(\mu). \quad (1.9)$$

Константы E , A , K_+ , θ , μ_a , μ_{min} и μ_{max} можно рассчитать по алгоритму, описанному в [6, 35].

Таким образом, как и [6, 7], предлагаемая модель позволяет рассчитать μ и U , а именно они входят в уравнения Эйлера, из алгебраических формул и всего одного обыкновенного дифференциального кинетического уравнения (1.5).

Как и модель [6, 7], предлагаемая модель описывает и химическое равновесие. В этом случае кинетическое дифференциальное уравнение трансформируется в явное квадратное уравнение относительно μ (в состоянии химического равновесия $d\mu / dt = 0$). Оно имеет один физический корень, лежащий между μ_{min} и μ_{max} . Поправку в (1.6) следует занулить, и (1.6), (1.8) и (1.9) позволят рассчитать U , U_{chem} и U_{therm} из явных алгебраических формул от T и μ .

Точность расчета химического равновесия по предложенной модели можно показать на расчете параметров волны Чепмена-Жуге (смесь в звуковой точке химически равновесна). Соответствующая система уравнений приведена в [35].

Тестовые расчеты параметров волны Чепмена-Жуге для (1.1) при $\alpha=0, 1, 0,6$ и $0,9$, сделанные с учетом предложенной обобщенной модели, сравнивались с соответствующими расчетными данными, получен-

ными с помощью известного онлайн термодинамического калькулятора CEARUN (NASA) [43], в котором используются уравнения детального химического равновесия. Сравнение параметров волны показало, что вычисления по разработанной кинетической модели и по модели CEARUN дают близкие величины и различия не превышают нескольких процентов.

Отметим, что в рамках предлагаемой кинетической модели U_{therm} и в зоне индукции, и в зоне основного тепловыделения рассчитывается по приближенной формуле (1.8). В то же время, детальный химический состав (1.3) также позволяет рассчитать U_{therm} в зоне индукции по соответствующим энтальпиям образования компонент (например, из справочника [37]). Расчет U_{therm} в зоне индукции по (1.8) более удобен, поскольку в зоне основного тепловыделения также используется формула (1.8), и, соответственно, при переходе из зоны индукции в зону основного тепловыделения рассчитанная величина U_{therm} будет непрерывной. Добавим, что, как и в модели [6, 7], точность формулы (1.8) для рассматриваемой двухтопливной смеси не хуже $RT / 2\mu$.

Период индукции τ в смеси (1.1) будем рассчитывать по формуле [38]:

$$\tau = \tau_{H_2}^\alpha \tau_{CH_4}^{1-\alpha},$$

где τ_{H_2} и τ_{CH_4} – периоды индукции в смесях H_2 -воздух и CH_4 -воздух.

Для τ_{H_2} и τ_{CH_4} воспользуемся формулам [39-31] и [42]:

$$\tau_{H_2} = \frac{A_{H_2}}{[O_2]} e^{E_{H_2}/RT},$$

$$\tau_{CH_4} = \frac{A_{CH_4}}{[O_2]} e^{E_{CH_4}/RT},$$

где $[O_2]$ – концентрация кислорода перед фронтом волны в моль/м³,
 $A_{H_2} = 24,83 \cdot 10^{-8}$ (моль·с/м³), $E_{H_2} = 71816$ Дж/моль = 17153 кал/моль,
 $A_{CH_4} = 6,0 \cdot 10^{-9}$ (моль·с/м³), $E_{CH_4} = 139001$ Дж/моль = 33200
 кал/моль. μ_{\min}

Константы модели E , A , K_+ , θ , μ_a , μ_{\min} и μ_{\max} рассчитывались для каждого значения α в соответствии с алгоритмом, представленным в [6, 35]. Например, при $\alpha = 0,6$: $\mu_a = 16,63 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, $\mu_{\min} = 17,36 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, $\mu_{\max} = 26,72 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, $A = 5,1 \cdot 10^8$ м³К^{-3/4}/(моль·с), $E = 4,6731 \cdot 10^5$ Дж/моль, $\theta = 3000$ К. Согласно [6, 7, 35] константа K_+ от начального состава смеси не зависит: $K_+ = 0,6 \cdot 10^3$ м⁶/(моль²·с).

Сделаем принципиально важные замечания по расчету периода индукции. В литературе имеется целый набор аррениусовских формул (с соответствующими константами) для расчета периода индукции в смесях СН₄ с воздухом и Н₂ с воздухом, полученные экспериментально или теоретически. Некоторые из них известны уже десятки лет. (i) Экспериментальные формулы получены разными авторами, по различным методикам и не всегда при абсолютно одних и тех же условиях. И, что особенно важно, прямое экспериментальное измерение периода индукции не производилось непосредственно за фронтом реальной детонационной волны. Например, для измерения периода индукции использовались отраженные от жесткой стенки ударные волны только в сильно разбавленных реагирующих смесях. Это сделано для того, чтобы удлинить период индукции настолько,

чтобы его можно было измерить на имеющемся оборудовании. (ii) Неотъемлемым недостатком теоретических расчетов периода индукции с использованием детальных кинетических схем в одно- и многокомпонентных углеводородных горючих со сложным кинетическим механизмом является то, что они, как правило, не верифицированы непосредственно на двумерных численных расчетах детонационных структур. Это связано с тем, что подобных расчетов очень немного, и они, как правило, не могут быть выполнены в ближайшие годы из-за ограничений, связанных с вычислительными возможностями современных компьютеров, несмотря на взрывной рост их мощностей. К этому следует добавить и проблемы с выбором констант, и необходимость выбора наиболее приемлемой кинетической модели по соответствию расчета эксперименту. Поэтому работоспособность используемых в работе формул для расчета периода индукции, как, собственно, и всей кинетической модели в целом, нужно, главным образом, определять по соответствию расчетов параметров и структуры ДВ эксперименту.

Отметим, что предлагаемая кинетическая модель справедлива для всех возможных значений α . Как и модели [6, 7, 35], она физически обоснована, проста, и, как показали приведенные ниже расчеты, имеет хорошую точность при численном моделировании многофронтной детонации. И верифицировать ее следует в рамках численных расчетов многофронтной структуры ДВ.

Расширение предлагаемой кинетической модели на нестехиометрические смеси возможно. Алгоритм такого расширения следующий. Изменится вид брутто-реакции. Вместо $CH_4 + O_2 \rightarrow CO + OH + 1,5H_2$ необходимо использовать реакцию $CH_4 + O_2 \rightarrow CO + OH + (1,5 - \sigma)H_2 + 2\sigma H$, где σ подбирается из условия малости величины тепловыделения брут-

то-реакции по сравнению с максимально возможным тепловым эффектом сгорания метано-водородной смеси. Величина σ будет зависеть от начального химического состава смеси. Формулы (1.5)-(1.9) останутся без изменений. Можно использовать и приведенную выше формулу для расчета периода индукции в двухтопливной смеси τ . Возможно, можно использовать и другие формулы для расчета τ , если они имеются в литературе. Алгоритм вычисления констант модели (например, $\mu_a, \mu_{\min}, \mu_{\max}, E, A$) не изменится. Модель невозможно расширить на нестехиометрические метано-водородные смеси только в том случае, если окислителя настолько мало, что общее количество атомов углерода в смеси превышает количество атомов кислорода. В этом случае предположения, положенные в основу кинетической модели, будут несправедливы.

Предлагаемая модель кинетики справедлива до таких давлений в ДВ, при которых газовую смесь можно считать идеальной. Она работает и до таких детонационных температур, при которых начинается сильная диссоциация молекул N_2 и CO на атомы. Как правило, столь высокие давления и температуры в двигателях с косой детонацией и в двигателях на вращающейся детонации не реализуются.

В предлагаемую модель кинетики входят константы констант. Но ни одна из них не является подгоночной. Все они выбираются до начала численного расчета параметров и структуры ДВ. Такие константы, как, например, $\mu_a, \mu_{\min}, \mu_{\max}, E, \theta$ и, вообще говоря, A – вычисляются на основании начального химического состава смеси. Вид и константы аррениусовских формул для расчета τ_{H_2}, τ_{CH_4} также выбираются до начала численных расчетов с использованием предлагаемой кинетической модели.

В [6, 7, 35] для расчета химической части внутренней энергии газовой смеси U_{chem} используется принадлежащая Ю.А. Николаеву формула:

$$U_{chem} = E \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{min}} \right). \quad (1.10)$$

Приведем строгий математический вывод формулы для расчета U_{chem} . Он принадлежит Ю.А. Николаеву (частное сообщение) и нигде ранее не приводился.

Рассмотрим газовую смесь, состоящую из одно-, двух- и трехатомных молекул A_i , A_{ij} , A_{ijk} соответственно, число которых в смеси равно $N_i, N_{i,j}, N_{i,j,k}$. Химические части внутренней энергии (энтальпии образования) рассматриваемых молекул обозначим $E_i, E_{i,j}, E_{i,j,k}$. Таким образом, рассматриваемая смесь имеет вид:

$$\sum_i N_i A_i + \sum_{i,j} N_{i,j} A_{i,j} + \sum_{i,j,k} N_{i,j,k} A_{i,j,k}.$$

Примем, что энергии диссоциации компонент равны между собой. То есть энергии диссоциации двухатомных молекул на два атома и трехатомных молекул на двухатомную молекулу и атом равны между собой. Пусть E – энергия диссоциации продуктов реакции. Тогда:

$$E_{i,j} = E_i + E_j - E, \quad (1.11)$$

$$E_{i,j,k} = E_i + E_j + E_k - 2E. \quad (1.12)$$

Удельная (на единицу массы) химическая часть внутренней энергии рассматриваемой смеси равна:

$$U_{chem} M = \sum_i N_i E_i + \sum_{i,j} N_{i,j} E_{i,j} + \sum_{i,j,k} N_{i,j,k} E_{i,j,k},$$

где M – масса рассматриваемой смеси. С учетом (1.11) и (1.12) получим:

$$\begin{aligned} U_{chem} M &= \sum_i N_i E_i + \sum_{i,j} N_{i,j} (E_i + E_j) - \\ &\quad - \sum_{i,j} N_{i,j} E + \sum_{i,j,k} N_{i,j,k} (E_i + E_j + E_k) - \\ -2 \sum_{i,j,k} N_{i,j,k} E &= \sum_i N_i E_i + \sum_{i,j} N_{i,j} (E_i + E_j) + \sum_{i,j,k} N_{i,j,k} (E_i + E_j + E_k) + \\ &\quad + (\sum_i N_i + \sum_{i,j} N_{i,j} + \sum_{i,j,k} N_{i,j,k}) E - (\sum_i N_i + 2 \sum_{i,j} N_{i,j} + 3 \sum_{i,j,k} N_{i,j,k}) E. \end{aligned}$$

Принимая во внимание, что:

$$\mu = \frac{M}{\sum_i N_i + \sum_{i,j} N_{i,j} + \sum_{i,j,k} N_{i,j,k}},$$

$$\mu_{\min} = \frac{M}{\sum_i N_i + 2 \sum_{i,j} N_{i,j} + 3 \sum_{i,j,k} N_{i,j,k}},$$

имеем:

$$\begin{aligned} U_{chem} M &= \sum_i N_i E_i + \sum_{i,j} N_{i,j} (E_i + E_j) + \\ &\quad + \sum_{i,j,k} N_{i,j,k} (E_i + E_j + E_k) + E \frac{M}{\mu} - E \frac{M}{\mu_{\min}}. \end{aligned}$$

Поэтому:

$$U_{chem} = E \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{\min}} \right) + \frac{\sum_i N_i E_i + \sum_{i,j} N_{i,j} (E_i + E_j) + \sum_{i,j,k} N_{i,j,k} (E_i + E_j + E_k)}{M}. \quad (1.13)$$

Из (1.13) видно, что мы можем вычислить U_{chem} , если химический состав смеси ($N_i, N_{i,j}, N_{i,j,k}$) нам известен и величины E_i определены. Причем, не зависимо от начала отсчета химической части внутренней энергии, первое слагаемое в (1.13) присутствует всегда.

Если положить E_i, E_j, E_k нулю, то есть отсчитывать начало отсчета U_{chem} от предельно диссоциированного состояния, тогда второе слагаемое в (1.13) станет равным нулю и формула (1.10) справедлива.

В рамках обобщенной модели [35] водородо-кислородные смеси содержат только следующие одно- двух- и трех- атомные молекулы: Н, О, ОН, Н₂, О₂ и Н₂О. Атомарный и предельно диссоциированный составы этих смесей совпадают ($\mu_a \equiv \mu_{\min}$). Причем они образованы только двумя видами атомов (О и Н). Соответственно, в (1.11) E_k равна либо E_i , либо E_j . Сделанные замечания на полученные выше формулы не влияют.

В частном случае, если $E_i = E_j = E_k = E_0 = const$, получаем:

$$U_{chem} = E \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{\min}} \right) + \frac{E_0}{\mu_{\min}},$$

откуда также следует возможность вычисления U_{chem} по известному значению μ_{\min} . Положив

$$E_0 = \mu_{\min} \left(\frac{E}{\mu_{\min}} - \frac{E}{\mu_{\max}} \right),$$

получим:

$$U_{chem} = E\left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{max}}\right).$$

Никакого преимущества по сравнению с (1.10) это не дает.

В рамках обобщенных кинетических моделей [6, 7, 35] N_2 и CO не диссоциируют, а в качестве начала отсчета U_{chem} выбрано предельно диссоциированное состояние, в котором смесь может содержать только компоненты H , O , Ar , CO и N_2 , химическая часть внутренней энергии которых полагается равной нулю. По аналогии с приведенными выше рассуждениями можно легко показать, что формула (1.10) остается справедливой и в этом случае.

Чтобы рассчитать величину E , можно рассмотреть переход смеси из предельно диссоциированного в предельно рекомбинированное состояние:

$$\sum_i a_i^d A_i \rightarrow \sum_i a_i^r A_i,$$

где A_i – символы химических элементов, a_i^d и a_i^r – соответствующие стехиометрические коэффициенты. Приравнявая соответствующее изменение внутренней энергии, рассчитанной по формулам:

$$E\left(\frac{1}{\mu_{max}} - \frac{1}{\mu_{min}}\right)$$

и

$$\sum_i a_i^r D_i,$$

где D_i - энергия диссоциации компонента A_i на атомы, получим:

$$E = \frac{\sum_i \tilde{a}_i^r D_i}{\sum_i \tilde{a}_i^d - \sum_i \tilde{a}_i^r}.$$

1.3. Алгоритм численного двумерного расчета

Система уравнений, начальные и граничные условия, математические методы и алгоритм расчета параметров и структуры ДВ, использованные в настоящей работе, аналогичны изложенным в [5–7, 40, 41].

Прямое инициирование ДВ обеспечивалось мгновенным энерговыделением (скачком давления и температуры) в квадратной области у левой закрытой стенки плоского канала. Очаг инициирования располагался в центре канала. Характерные размеры очага: $\Delta x * \Delta y = 0,4H * 0,4H$, где H – ширина канала. В начальный момент времени объемная плотность внутренней энергии смеси в очаге инициирования увеличивалась примерно на $\Delta E \approx 1,58 \cdot 10^7$ Дж/м³, что приводило к повышению давления в нереагирующем газе до 65÷70 атм и температуры до 3300÷3500 К. Размеры очага $\Delta x * \Delta y$ и величина ΔE для каждого состава смеси немного варьировались для обеспечения заведомо сверхкритического режима инициирования незатухающей ДВ. Но точные значения минимально необходимых значений размера области выделения энергии и энергии инициирования не определялись.

Численный расчет распространения ДВ выполнялся до выхода детонации на самоподдерживающийся режим. Полагалось, что в этом стационарном (в среднем по времени) режиме ДВ должна пройти дистан-

цию минимум десять калибров. Многофронтная (ячеистая) структура ДВ определялась на этом финальном участке. Фронт волны при этом успевал пройти расстояние в несколько десятков калибров от места инициирования (от пятидесяти до ста).

В работе представлены только финальные графические результаты по подбору ширины канала H так, чтобы $H \approx a_0$. Используемая в работе процедура расчета размера детонационной ячейки стандартна (см., например, монографию [45]) Численное моделирование начиналось с широкого канала, в котором определялась многофронтная структура ДВ в исследуемой смеси. При этом ширина канала выбиралась достаточно произвольно и обычно составляла от 8 до 12 предполагаемых поперечных размеров детонационной ячейки. Отметим, что если ширина канала H в k раз больше, чем размер ячейки, то в него укладывается k ячеек, а число основных поперечных волн равно $2k$. По этим результатам грубо вычислялся первоначальный размер a_0 . И в дальнейшем этот размер ячейки уточнялся в расчетах с узким каналом $H \approx a_0$ путем незначительного варьирования величины H . За первоначальную ширину узкого канала брался размер ячейки, определенный в широком канале. Эти два размера ячейки соответствуют друг другу с точностью примерно 10÷15%. За финальный размер ячейки бралось значение, полученное при моделировании в узком канале, полученное при более высоком пространственном разрешении численной сетки. Рассчитывалась такая ширина канала, чтобы после достижения постоянной средней скорости волны на переднем детонационном фронте присутствовали две мощные основные поперечные волны, максимально симметричные по пространству и амплитуде, и движущиеся в противофазе. друг относительно друга. Ширина детонационной ячейки принималась равной та-

кой ширине канала. Данный алгоритм позволяет рассчитать размер ячейки с некоторой погрешностью, поскольку при незначительном увеличении или уменьшении размера канала относительно размера детонационной ячейки число первичных поперечных волн остаётся равным двум. Этот эффект регистрируется и в эксперименте. Если ширина канала существенно отличается от размера детонационной ячейки, число первичных поперечных волн во фронте волны не равно двум или их размер и интенсивность существенно различны.

Численное интегрирование системы уравнений осуществлялось на адаптивной движущейся в направлении распространения волны сетки с локальным сгущением вблизи переднего ударного фронта. По оси y использовалась равномерная расчетная сетка. Более подробно построение сетки описано в [7–9].

Общее число расчетных ячеек по оси x равнялось N_x . Неравномерная часть сетки по продольной координате содержала N_{x2} ячеек и охватывала течение между $x=0$ и равномерной частью сетки. Равномерная часть сдвигалась вместе с детонационной волной. Она покрывала поток с большими пространственными и временными градиентами в окрестности переднего детонационного фронта и содержала N_{x1} ячеек размером h_x . Для равномерной и неподвижной расчетной сетки по поперечной координате $h_y=H/N_y$, где h_y и H – размер ячейки и ширина канала, N_y – число ячеек. Большая часть расчетов выполнена для $N_x=2000$, $N_{x1}=1750$, $N_y=2000$ и $h_y=h_x$.

Полученная система уравнений решается численно с использованием разработанного кода на основе конечно-объемной схемы типа Годунова с MUSCL TVD реконструкцией четвертого порядка по пространству и усовершенствованного HLLC алгоритма для приближенного безитерацион-

ного решения задачи Римана. При реализации HLLC алгоритма для случая химически реагирующей смеси используется «метод релаксации энергии» Coquel-Perthame. Этот метод снимает проблему численного решения задачи Римана для среды со сложным нелинейным уравнением состояния (в том числе с переменным соотношением теплоемкостей). Интегрирование по времени выполняется со вторым порядком точности с использованием аддитивных полунеявных методов Рунге-Кутты. Все подробности о использованном алгоритме численного расчета и отдельных его составляющих можно найти в [6, 7, 35] и [63-70] соответственно.

Численный код параллелизовался в рамках подхода «domain decomposition». Количество ядер ЦП по осям x и y составляло $N_{prx}=16$ и $N_{pry}=16$.

Для нахождения a_0 , как правило, было достаточно выполнить 3–4 и 6–8 итераций по ширине канала для регулярных и нерегулярных ячеек структур соответственно.

Вариация ширины канала на 10 и более процентов относительно a_0 приводила к заметному нарушению симметрии между основными поперечными волнами, исчезновению одной из них или образованию двух поперечных волн,двигающихся в одном направлении. Соответственно, ошибка численного расчета a_0 в рамках проведенного моделирования, если не указано иное, не превышала 10%.

Построение двумерных численных следовых отпечатков в данном исследовании не проводилось. Следовые отпечатки – один из простых методов определения размера геометрических параметров ячейки, ее размера, формы и структуры (регулярной, нерегулярной, квали-регулярной, бифуркационной). Но в настоящее время они являются далеко не единственным способом получения информации о многофронтной

структуре ДВ. Причем при начальных и повышенных атмосферных давлениях (конкретное значение зависит от смеси) использование следового метода достаточно проблематично или невозможно. Сажа уносится высокоскоростными детонационными продуктами и выгорает. Глубокий анализ соответствия рассчитанных полей течения в ДВ и численных следовых отпечатков показывает, что мгновенные пространственные распределения параметров потока дают больше информации для физического анализа. При этом, естественно, следовые отпечатки являются более адаптированными для зрительного восприятия ячеистой структуры. Дополнительно отметим, что построение численной ячеистой структуры, помимо существенного усложнения компьютерной программы, чрезвычайно затратно с точки зрения объема вычислений. Настоящее исследование ДВ в бинарной смеси выполнено с исключительно высоким пространственным и временным разрешением, что потребовало значительных затрат машинного времени. Исходя из имеющихся у нас вычислительных возможностей, численное построение еще и следовых отпечатков весьма затруднительно.

Численные расчеты параметров и структуры ДВ проводились для значений α , равных 0, 0,6, 0,8 и 1,0. Расчеты выполнены на пределе имеющихся у авторов вычислительных возможностей. Этим обстоятельством обусловлено относительно небольшое число рассмотренных составов. В то же время расчеты покрывают весь диапазон изменения α .

1.4. Результаты расчетов и обсуждение

Результаты расчета детонационных структур представлены на рис. 1.1–1.9, x_{fr} – расстояние от лидирующего ударного фронта до левой (закрытой) границы канала $x=0$, r/r_0 – нормализованная плотность, p/p_0 –

нормализованное давление, поле температуры T представлено в градусах Кельвина. Индекс “0” обозначает начальные параметры смеси, расчеты проведены при стандартных начальных условиях $p_0=1$ атм, $T_0=293,15$ К. Детонационный фронт распространяется слева направо вдоль канала. ПВ на фронте ДВ выпуклы в сторону своего распространения поперек канала.

Рис. 1.1–1.3 соответствуют смеси (1) при $\alpha=0,6$. На рис. 1.1 показан расчет при $a_0 = H = 7$ см. Расчетная величина a_0 хорошо соответствует эксперименту (6,0÷6,5 см [16, 17, 19]). Структура ДВ включает две практически равные по интенсивности основные ПВ, обозначенные как АА и ВВ. Они движутся в противофазе по поперечной координате. Их положение относительно оси канала тоже довольно симметрично. Имеются и вторичные ПВ, некоторые из которых обозначенные как аа, bb и сс. Присутствуют еще более мелкие возмущения (третичные ПВ) на фронте ДВ. В зоне реакции образуются и небольшие островки несгоревшего газа. Нерегулярность рассматриваемой многофронтной структуры ДВ проявляется в отсутствии строгой симметрии течения, наличии системы вторичных/третичных ПВ и небольших областей несгоревшего газа.

В рассматриваемом канале режим ДВ с двумя основными ПВ устойчив. Увеличение пройденного ДВ расстояния с $x_{fr} = 348$ см до $x_{fr} = 800$ см не приводит к какому-либо существенному изменению в структуре. Мелкие детали течения, такие как вторичные и еще более мелкие ПВ, число и форма островков несгоревшего газа, и т.д., конечно, по мере распространения ДВ, варьируются. Из сравнения рис. 1.1, 1.2 и 1.3 видно, что уменьшение или увеличение высоты канала относительно размера ячейки на 0,5 см приводит к потере симмет-

ричности при столкновении основных ПВ, а также к росту размера вторичных ПВ и увеличению их числа. Таким образом, в рамках проведенных расчетов поперечный размер детонационной ячейки для рассматриваемой смеси определен с ошибкой, не превышающей 8%.

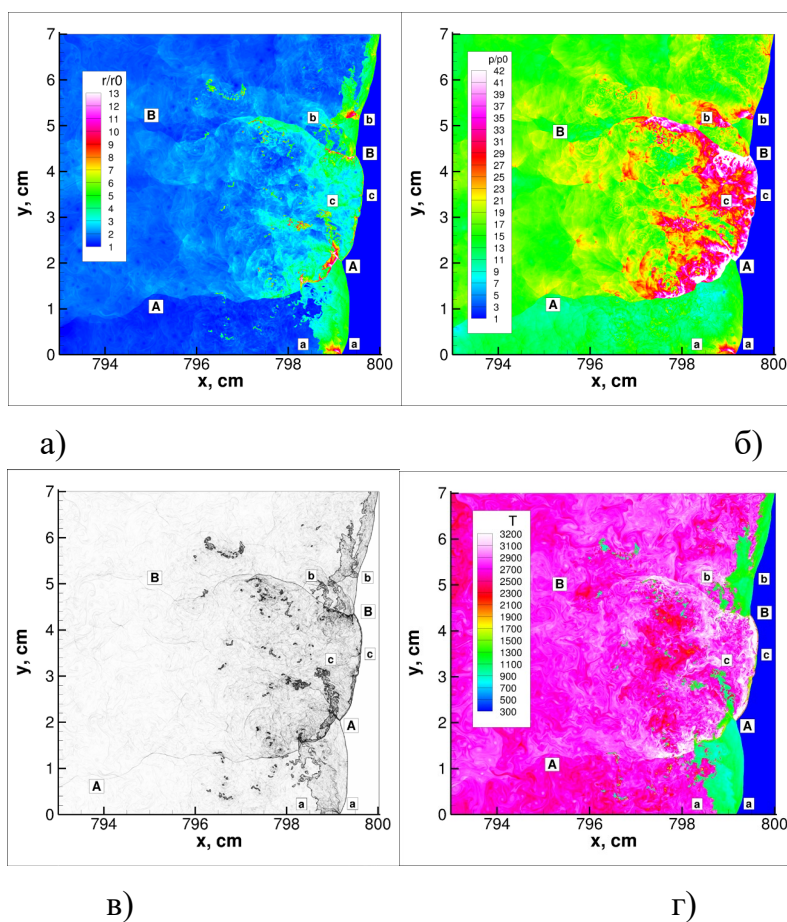
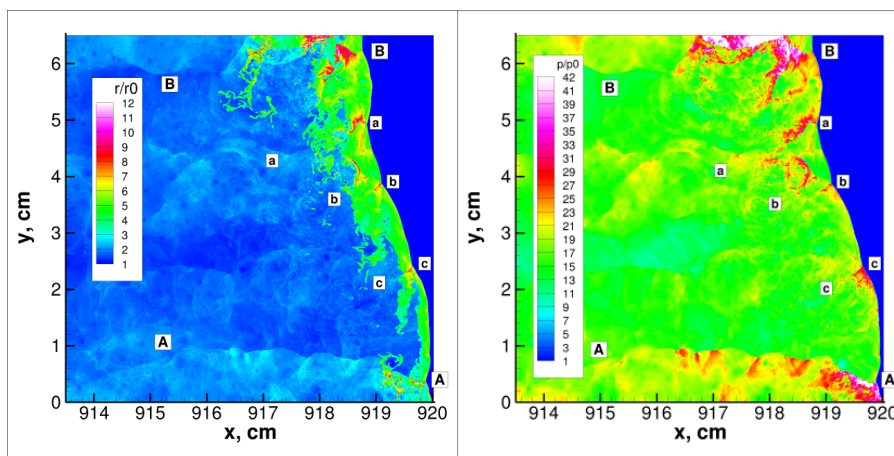
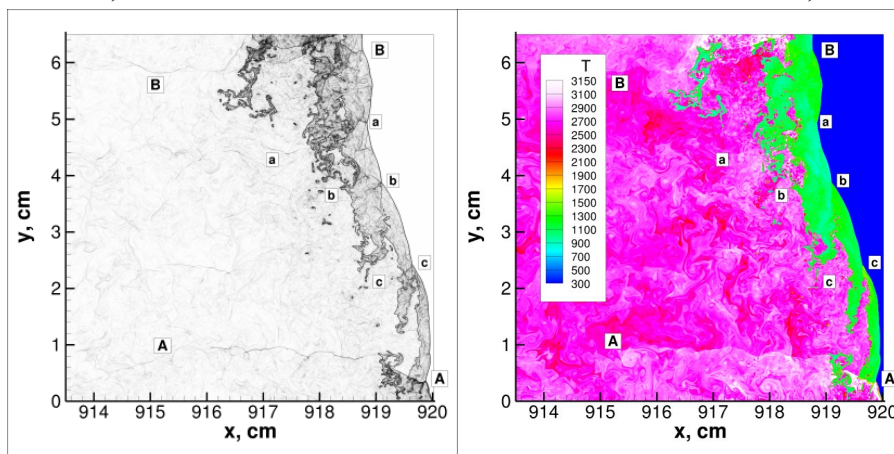


Рис. 1.1. Результаты расчета ячеистой структуры.
 Смесь $0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1,1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0,6$, $a_0=H=7$ см, $x_{fr}=800$ см.
 а) относительная плотность; б) относительное давление;
 в) шликрен; г) T , К.



а)

б)



в)

г)

Рис. 1.2. Результаты расчета ячеистой структуры.
Смесь $0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1,1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0,6$, $H=6,5$ см, $x_{fr}=920$ см.

а) относительная плотность; б) относительное давление;
в) шлирен; г) T , К.

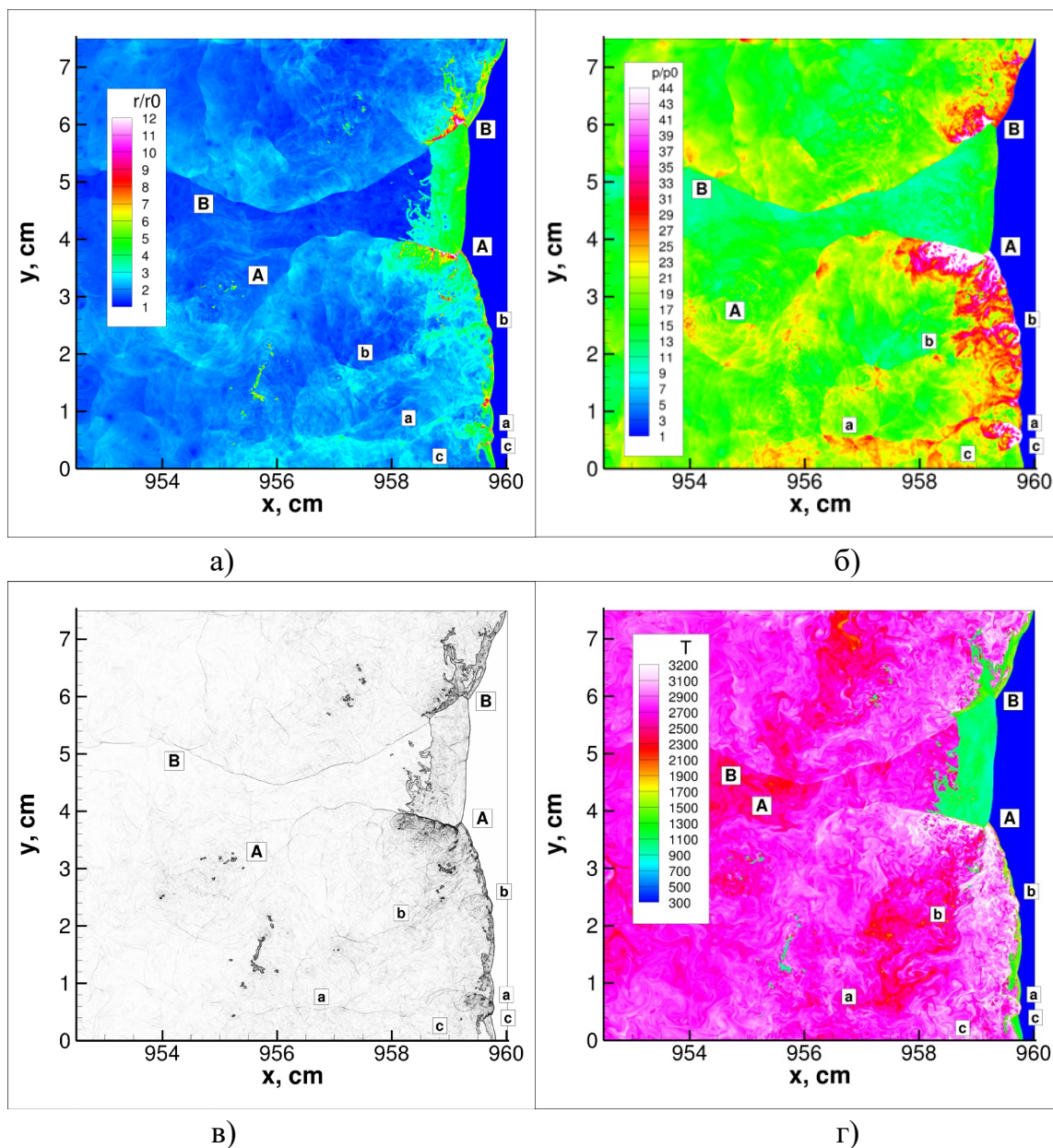


Рис. 1.3. Результаты расчета ячеистой структуры.

Смесь $0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1,1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0,6$, $H=7,5$ см, $x_{fr}=960$ см.

а) относительная плотность; б) относительное давление;

в) шлирен; г) T , К.

На рис. 1.4 показана скорость распространения фронта ДВ (сплошная кривая) в зависимости от координаты; $H=7$ см, параметры расчета соответствуют рис. 1.1. ДВ выходит на квази-стационарный режим на расстоянии $x_{front} = 3 \div 3,5$ м. Средняя скорость ДВ, рассчитанная между точками

$x_{front}=500$ см и $x_{front}=812$ см равна $D_{cp}=1838$ м/с (пунктирная линия). Эта величина несколько выше, чем скорость детонации Чепмена-Жуге (штрих-пунктирная линия) $D_{чж}=1812$ м/с, полученная с учетом детальных уравнений химического равновесия. Приблизительно такая же разница по абсолютной величине имеет место для водородо-кислородных смесей с регулярной детонационной структурой [5] и стехиометрической метано-воздушной смеси с нерегулярными ячейками.

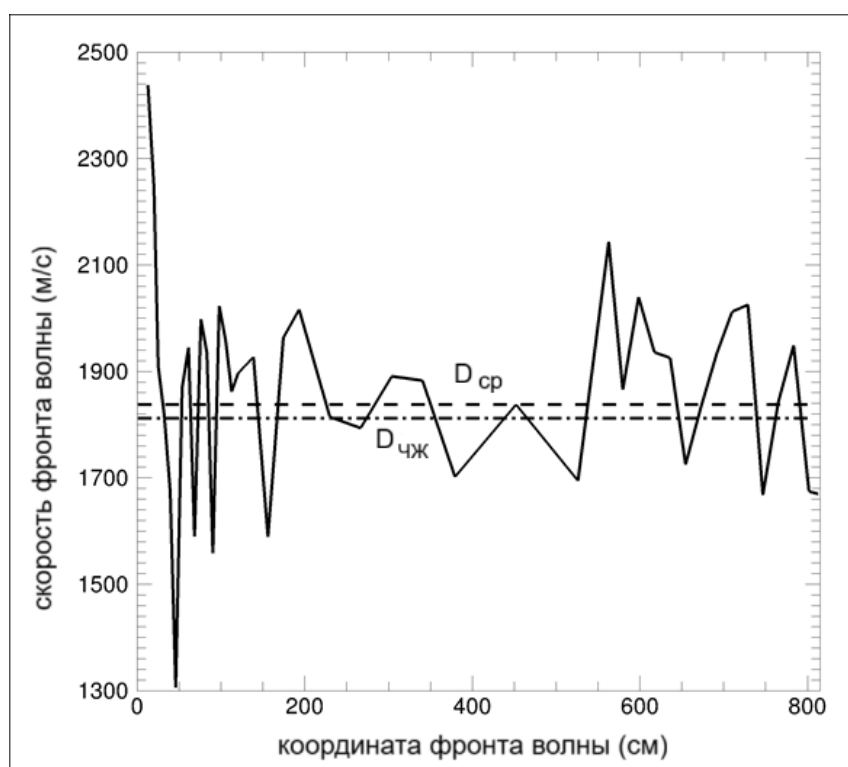


Рис. 1.4. Скорость ДВ (сплошная линия) как функция положения фронта. Смесь $0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1,1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0,6$ at $a_0=H=7$ см (см. Рис. 1.1). Средняя скорость $D_{aver} = 1838$ м/с (пунктирная линия). Скорость волны Чепмена-Жуге $D_{CJ}=1812$ м/с (штрих-пунктирная линия)

На рис. 1.5–1.7 показаны результаты расчета структуры ДВ в смеси (1) при $\alpha = 0,8$. Ширина канала на рис. 1.5 равна поперечному размеру ячейки: $a_0 = H = 3,3$ см. Рассчитанный размер ячейки хорошо соответствует экспериментальным данным ($2,8 \div 3,3$ см [16, 17, 19]). Как и на

рис. 1.1, имеются две приблизительно равные по интенсивности и протяженности основные ПВ АА и ВВ. Но при этом они существенно не симметричны. Помимо них, имеется большое количество вторичных ПВ. Численные эксперименты показали, что в рассматриваемой смеси невозможно добиться полной симметрии основных ПВ при вариации H . Это свидетельствует о значительной степени нерегулярности ячеистой структуры ДВ. Из рис. 1.6 и 1.7 видно, что даже незначительное изменение ширины канала в меньшую и большую стороны всего на 1,5% относительно a_0 приводит к значительной деформации многофронтной структуры ДВ. То есть имеется своеобразный «резонанс» в отклике детонационной структуры на вариации параметра H . Так, уменьшение H до величины 3,25 см (рис. 1.6) приводит к существенному ослаблению основной ПВ ВВ и значительному усилению волны АА. При этом она имеет свою собственную систему поперечных волн на фронте, так называемую «тонкую структуру» переднего фронта волны. При увеличении ширины до $H = 3,35$ см (рис. 1.7) явно видно значительное усиление одной из вторичных ПВ, обозначенной как аа. По интенсивности и протяженности она почти сравнялась с основными ПВ АА и ВВ, которые практически одинаковы по форме и интенсивности.

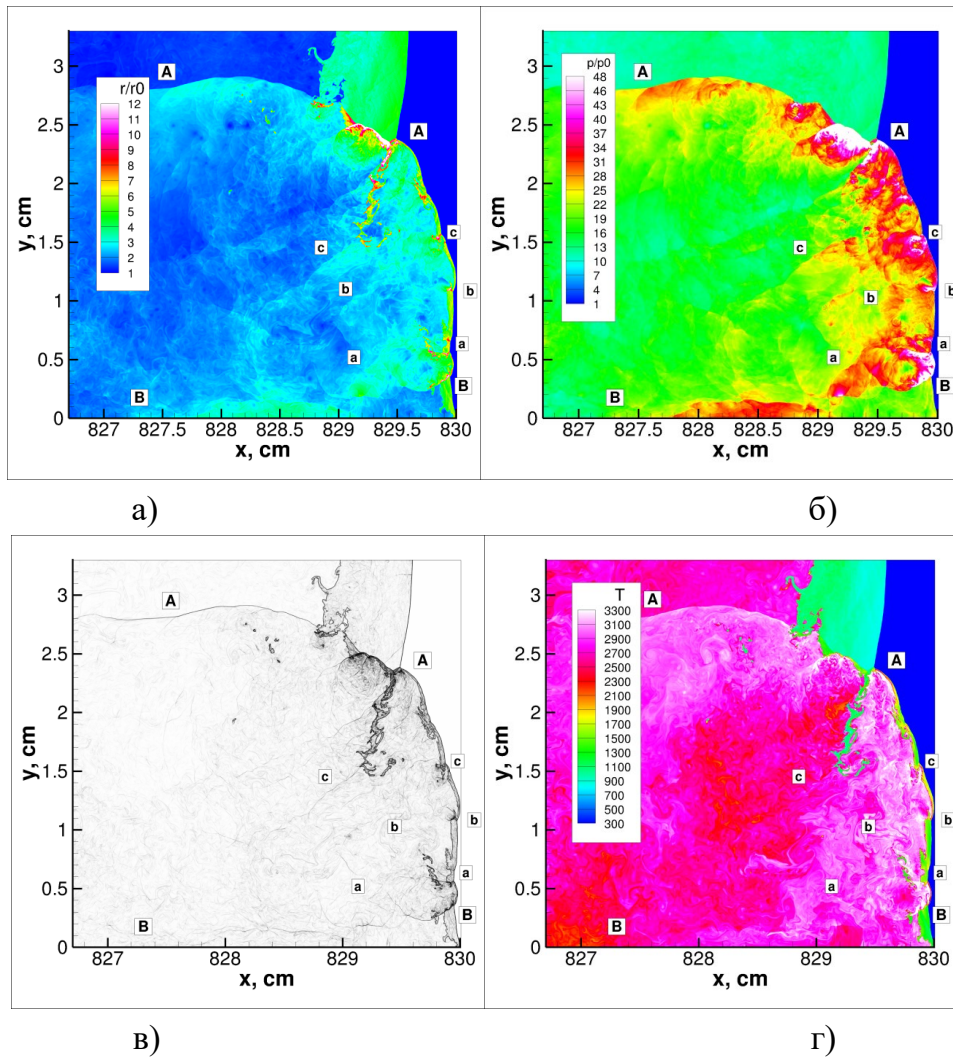
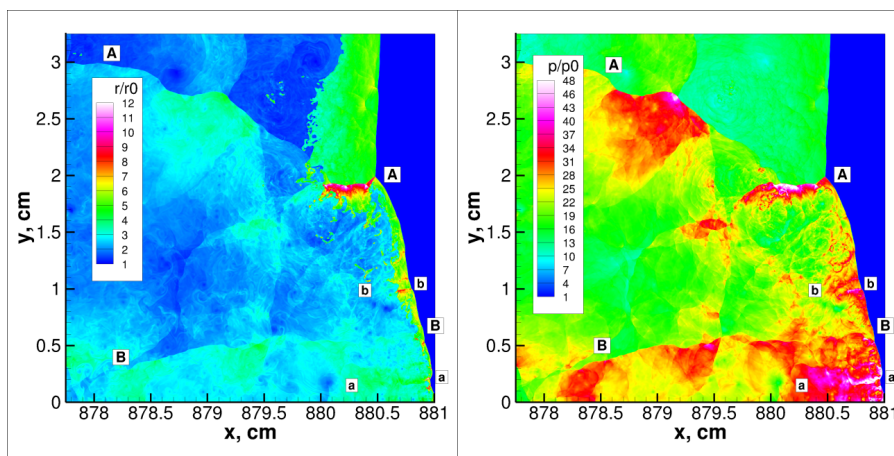
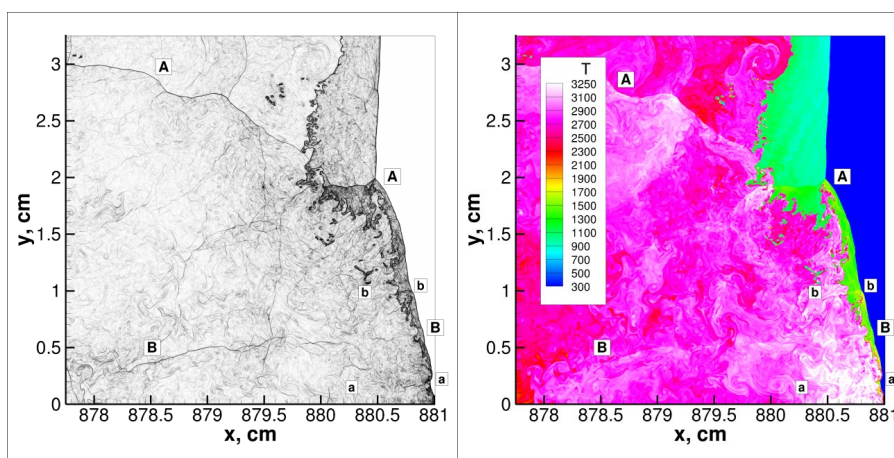


Рис. 1.5. Результаты расчета ячеистой структуры.
 Смесь $0,8\text{H}_2 + 0,2\text{CH}_4 + 0,8(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0,8$, $a_0=H=3,3$ см, $x_{fr}=830$ см.
 а) относительная плотность; б) относительное давление;
 в) шпирен; г) T , К.



а)

б)



в)

г)

Рис. 1.6. Результаты расчета ячеистой структуры.

Смесь $0,8\text{H}_2 + 0,2\text{CH}_4 + 0,8(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0,8$, $H=3,25$ см, $x_{fr}=881$ см.

а) относительная плотность; б) относительное давление;

в) шпирен; г) T , К.

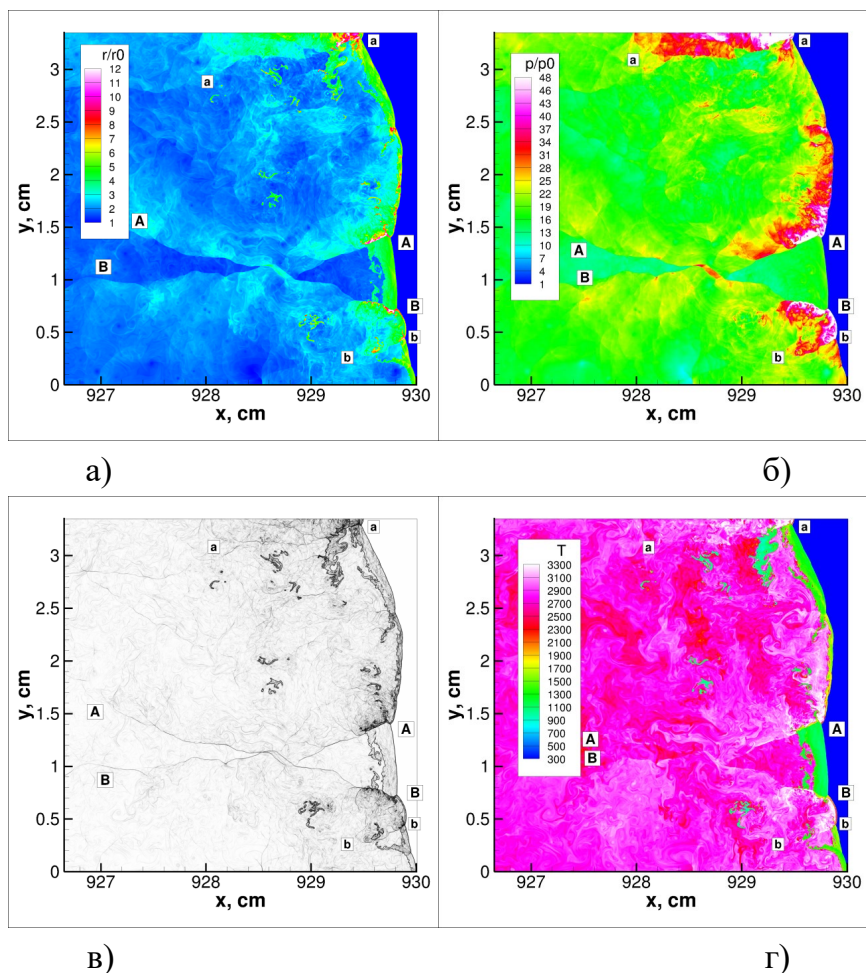


Рис. 1.7. Результаты расчета ячеистой структуры.

Смесь $0,8\text{H}_2 + 0,2\text{CH}_4 + 0,8(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0,8$, $H=3,35$ см, $x_{ff}=930$ см.

а) относительная плотность; б) относительное давление;

в) шлирен; г) T , К.

Из сравнения рис. 1.1 и 1.5 трудно сделать какой-либо однозначный вывод о различии в степени регулярности ячеистой структуры ДВ при изменении величины α от 0,6 до 0,8. Поскольку в стехиометрической водородо-воздушной смеси ($\alpha=1,0$) ячеистая структура ДВ близка к регулярной [17–19, 21], следует ожидать, что при увеличении α от 0,8 до 1,0 практически полная регуляризация детонационной структуры рано или поздно произойдет. Приведенные результаты расчета детонационных структур при величинах α , равных 0,6 и 0,8, резко контрастируют с результатами двумерного численного моделирования структуры ДВ в двухтопливной стехио-

метрической смеси окиси углерода с водородом (синтез-газ CO/H_2) [40, 41], согласно которым монотонное увеличение доли водорода ведет к монотонной регуляризации многофронтной структуры.

На рис. 1.8 показаны результаты расчета для $\alpha = 0$ (однотопливная стехиометрическая метано-воздушная смесь). Размер детонационной ячейки $a_0 = H = 33$ см и качественная структура ДВ хорошо соответствует эксперименту [20]. Аналогичные результаты расчетов получены ранее в [6, 7]. Видно, что структура ДВ сильно нерегулярна. Это проявляется в сильной пространственной несимметрии основных ПВ AA и BB, наличии большого набора несимметричных и хаотично двигающихся вторичных (третичных и т.д.) ПВ, в формировании областей несгоревшего газа в зоне реакции.

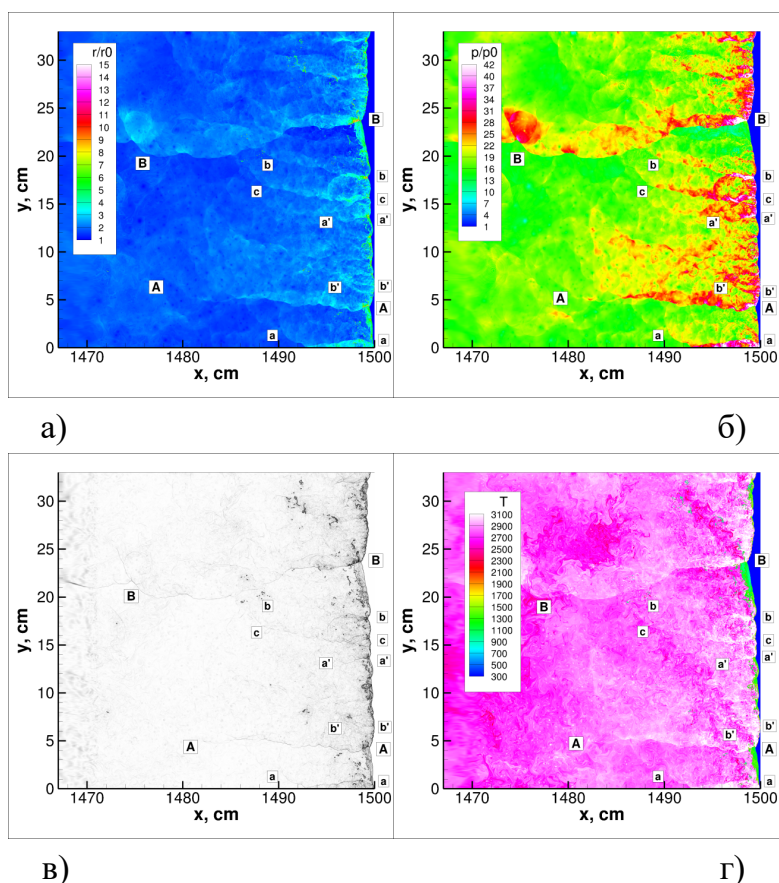


Рис. 1.8. Результаты расчета ячеистой структуры в стехиометрической метано-воздушной смеси $\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $a_0 = H = 33$ см, $x_{fr} = 1500$ см.

а) относительная плотность; б) относительное давление;
в) шпирен; г) T , К.

Результаты расчета для однотопливной стехиометрической водородо-воздушной смеси ($\alpha = 1$) приведены на рис. 1.9. Размер ячейки $a_0 = H = 1,4$ см хорошо соответствует экспериментальным данным ($0,8 \div 1,0$ см [16-19], 1,4 см [21, 44]). Соответствует эксперименту и качественная структура ДВ. Она близка к регулярной: присутствуют две движущиеся в противофазе по поперечной координате приблизительно симметричные по пространству и примерно одинаковые по амплитуде основные ПВ, отсутствуют вторичные ПВ и островки несгоревшего газа.

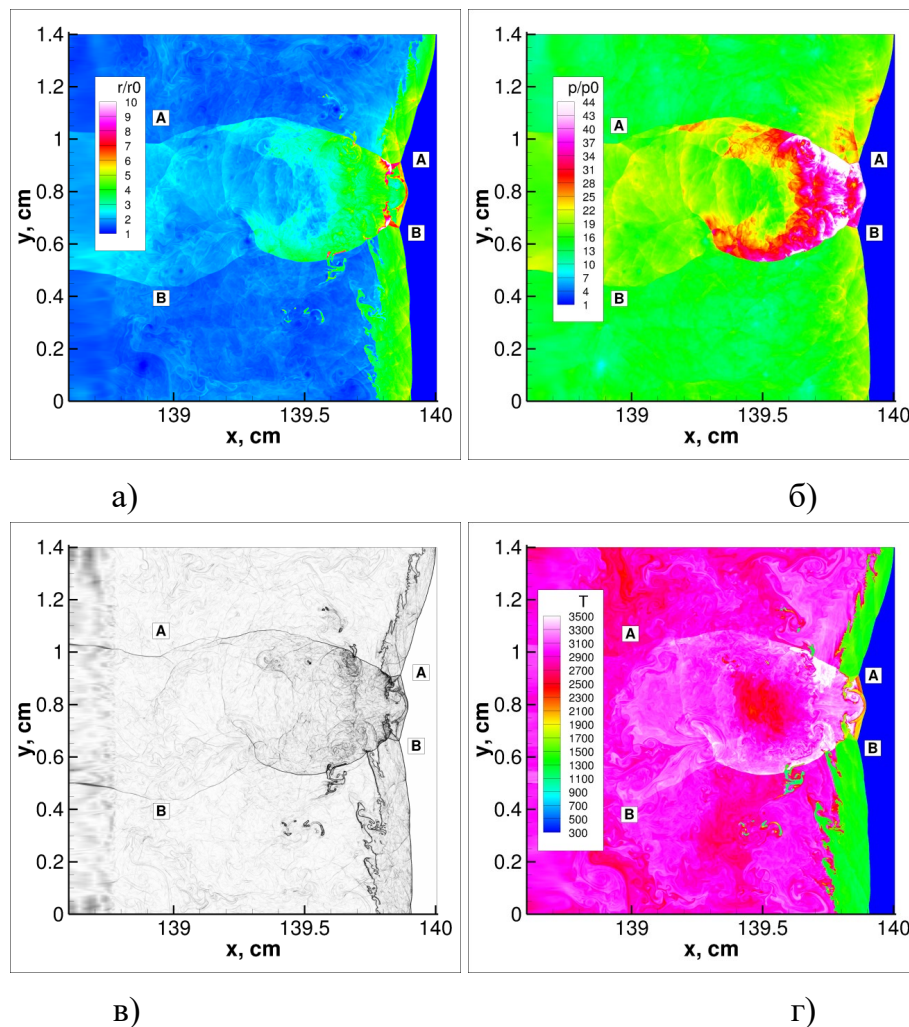


Рис. 1.9. Результаты расчета ячеистой структуры в стехиометрической водородо-воздушной смеси $H_2 + 0,5(O_2 + 3,76N_2)$, $\alpha=1$, $a_0 = H= 1,4$ см, $x_{fr} = 140$ см.

- а) относительная плотность; б) относительное давление;
в) шлирен; г) T , К.

На рис. 1.10 обобщены расчетные и экспериментальные (без указания экспериментальной ошибки) размеры детонационной ячейки для всех указанных выше смесей. Видно хорошее соответствие между ними. Для всех исследованных смесей величина a_0/b составляет $a_0/b=0,6\div 0,66$, где b – длина детонационной ячейки. Это тоже соответствует эксперименту.

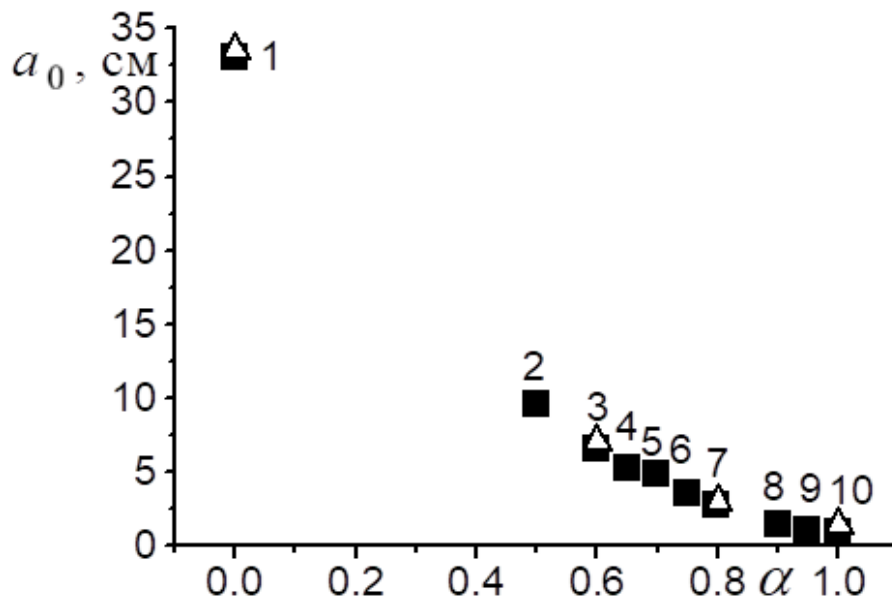


Рис. 1.10. Зависимость размера ячейки ДВ в смеси $\alpha\text{H}_2 + (1-\alpha)\text{CH}_4 + (2-1,5\alpha)(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$ от содержания водорода.

Треугольники – настоящий расчет. Квадраты – эксперимент: 1 – [20]; 2 – [16, 17]; 3, 6, 7, 10 – [17], 4 – [19], 5 – [17, 19], 8 – [17–19], 9 – [18].

В настоящей работе рассчитана структура ДВ вдали от пределов и без потерь (решение уравнений Эйлера). Результаты расчетов и по размеру ячейки, и по структуре волны (см. ниже) хорошо соответствуют эксперименту. Большое количество задач, связанных с распространением детонационной волны в каналах сложной геометрии и детонационных двигателях также может быть выполнено в рамках уравнений Эйлера.

Обоснованность использования уравнений Эйлера для моделирования детонационных течений в газах, и в частности многофронтной (ячеистой) структуры детонационных волн обсуждалась за последние 40-50 лет во множестве статей и монографий. Например, этот вопрос подробно рассмотрен в книге [45]. Ширина ударного вязкого перехода (толщина переднего ударного фронта) в волне газовой детонации меньше размера детонационной ячейки в сотни и тысячи раз. Это относится как к однопаливным, так и многотопливным смесям, как к углеводородным, так и чисто водородным газовым композициям с воздухом или кислородом. Наоборот, в пламенах ведущим механизмом волнового процесса является эффект молекулярного переноса в газах (диффузия импульса, массы и энергии). Уравнения Эйлера для них неприменимы.

Предлагаемая модель кинетики не имеет каких-либо особых ограничений на использование и с уравнениями Эйлера, и с уравнениями Навье-Стокса.

1.5 «Тонкая» структура переднего фронта детонационной волны

Проведем анализ полученной в расчетах структуры переднего фронта ДВ.

Согласно эмпирическому критерию, полученному в [32], передний фронт имеет «тонкую» структуру, если параметр $Z > 6.5$ ($Z = E_{ind}/RT_{10}$, где E_{ind} – эффективная энергия активации в зоне индукции, T_{10} – температура в зоне индукции одномерной ДВ в режиме Ч.-Ж.). При $Z < 6.2$ данная структура не существует.

Согласно нашей модели детонационной кинетики и расчету параметров волны Ч.-Ж. [43], для смеси $0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1,1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha = 0,6$, имеем $Z=8,4$. При этом на рис. 1.1–1.3 четко фиксируется «тонкая» структура переднего фронта ДВ. Для смеси $0,8\text{H}_2 + 0,2\text{CH}_4 + 0,8(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha = 0,8$, имеем $Z=7,3$. При этом рисунки 1.5–1.7 также показывают нали-

чие вторичных ПВ в этой смеси, то есть существование «тонкой структуры» фронта ДВ.

Для стехиометрической смеси метана с воздухом $\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0$, параметр Z равен $Z=10,8$, при этом рис. 1.8 и 1.11 показывают существование вторичных и третичных ПВ на лидирующем фронте ДВ. На рис. 1.12 и 1.13 показана структура ДВ в переобогащенной (коэффициент избытка топлива $\varphi=1,5$) метановоздушной смеси $1,5\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, в канале шириной $a_0 = H = 50$ см, при нормальных начальных условиях, рассчитанная в нашей работе [46, 47] по модели [6, 7]. На фронте волны видны многочисленные вторичные и третичные ПВ, а также очаги несгоревшей смеси в зоне тепловыделения, обозначенные как P1, P2, P3. Для этой смеси $Z=10,9$.

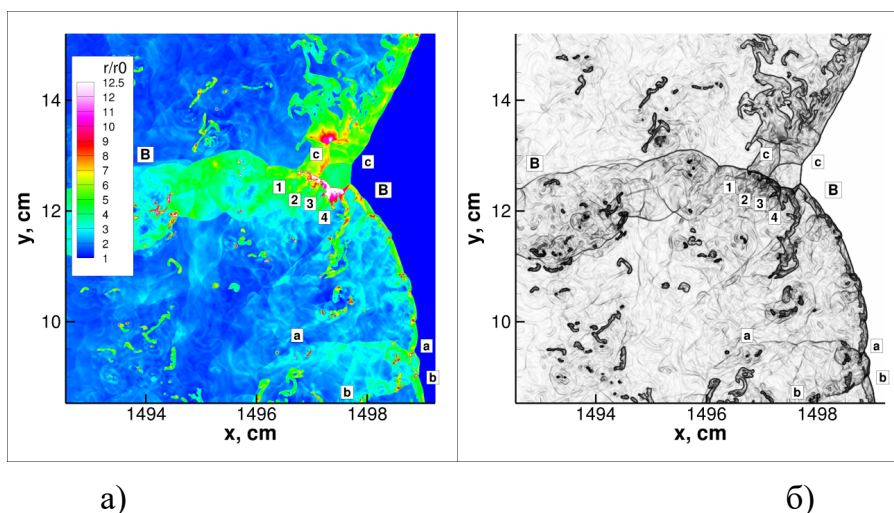


Рис. 1.11. Увеличенный фрагмент структуры фронта основной поперечной волны ВВ в стехиометрической метано-воздушной смеси $\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0$ при $a_0 = H = 33$ см, $x_{fr} = 1500$ см (см. рис. 1.8): а) относительная плотность; б) ширен.

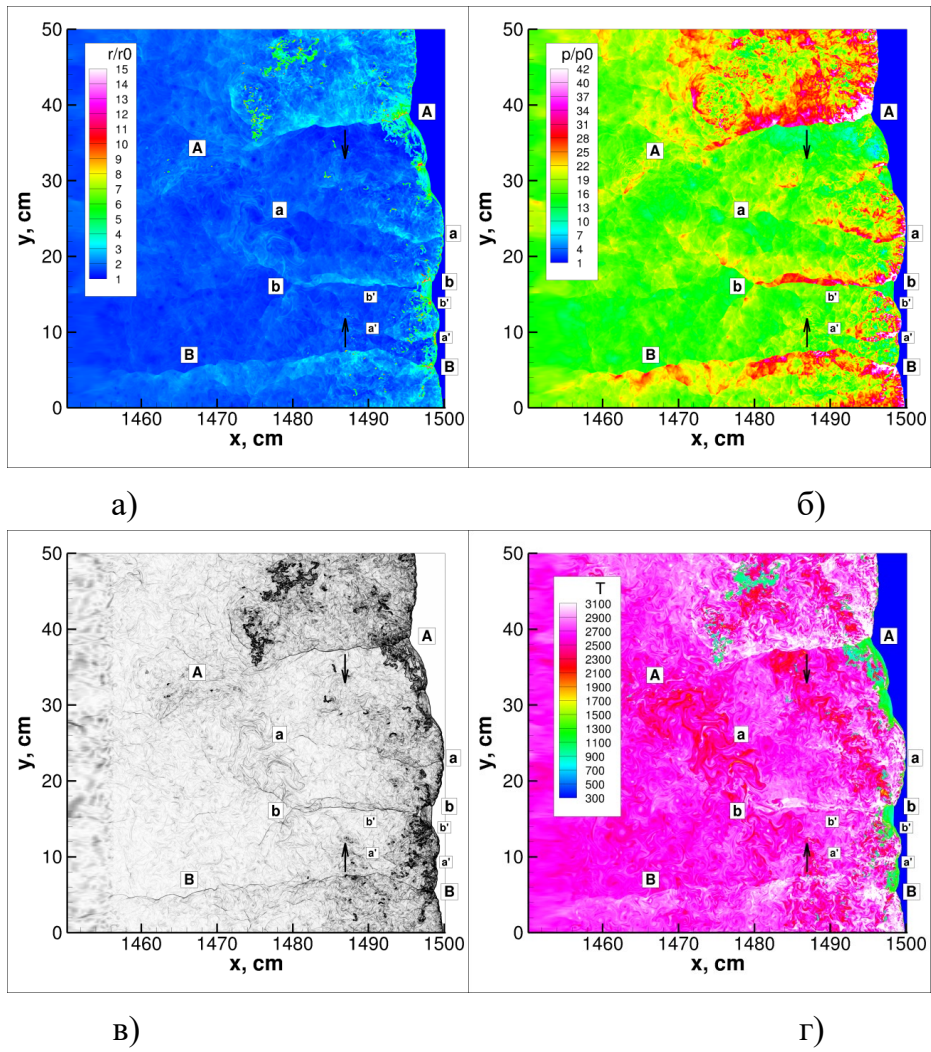


Рис. 1.12. Структура фронта ДВ в богатой метано-воздушной смеси $1,5\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\varphi=1,5$ при $a_0 = H = 50$ см, $x_{fr} = 1500$ см:
 а) относительная плотность; б) относительное давление;
 в) шлирен; г) T, K .

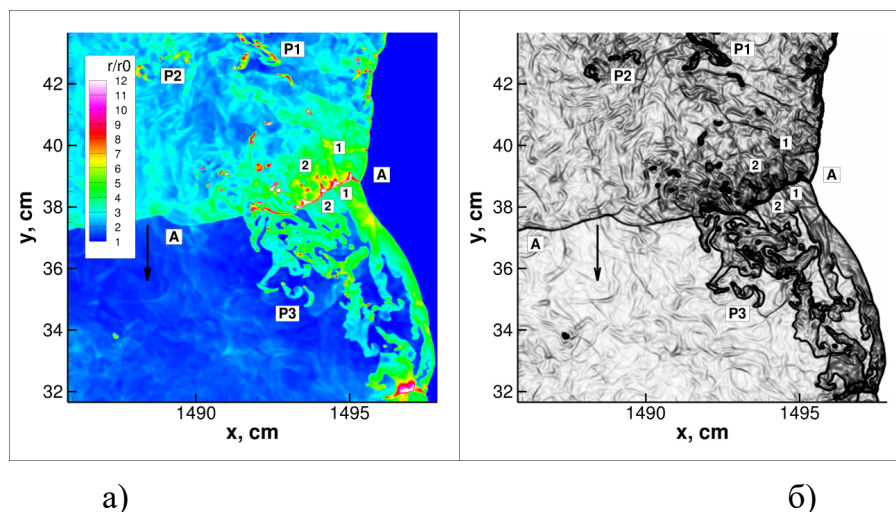


Рис. 1.13. Увеличенный фрагмент структуры фронта основной поперечной волны AA в богатой метано-воздушной смеси $1,5\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\varphi=1,5$ при $a_0 = H = 50$ см, $x_{fr} = 1500$ см (см. рис. 1.12).

а) относительная плотность; б) шпирен.

Для стехиометрической смеси метана с кислородом $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$ величина рассматриваемого параметра составляет $Z=8.35$. На рис. 1.14 и 1.15 показаны вторичные и третичные волны на фронте для данной смеси.

Для стехиометрической смеси водорода с воздухом $\text{H}_2 + 0,5(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=1$, имеем $Z=5.4$. Структура фронта ДВ в этой смеси показана на рис. 1.9. Виден гладкий лидирующий ударный фронт ДВ при полном отсутствии вторичных и третичных ПВ. Наши 2D численные эксперименты по исследованию структуры ДВ в стехиометрической смеси водорода с кислородом $\text{H}_2 + 0,5\text{O}_2$ [5, 40, 41], $Z=4.8$, показали аналогичный результат: отсутствие «тонкой структуры» переднего фронта ДВ. Отметим, что рассчитанные размеры детонационных ячеек для двух рассмотренных водородных смесей в пределах ошибки эксперимента согласуются со всей совокупностью экспериментальных данных.

Результаты численного моделирования по «тонкой структуре» переднего фронта ДВ обобщены в Таблице. Для метановых смесей и двухтопливных смесей метан-водород параметр Z был больше критического зна-

чения $Z=6.5$, и во всех этих смесях в численных экспериментах фиксировалась «тонкая» структура переднего детонационного фронта. В водородных смесях этот параметр меньше экспериментального критерия $Z=6.2$ и «тонкая» структура фронта ДВ отсутствует. Видно, что для рассмотренных примеров эмпирический критерий [32] выполняется.

Таблица Соответствие между величиной параметра Z и наличием «тонкой» структуры переднего фронта волны.

Смесь	Z	«Тонкая» структура
$0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1,1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$	8,4	Да
$0,8\text{H}_2 + 0,2\text{CH}_4 + 0,8(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$	7,3	Да
$\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$	10,8	Да
$1,5\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$	10,9	Да
$\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$	8,35	Да
$\text{H}_2 + 0,5(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$	5,4	Нет
$\text{H}_2 + 0,5\text{O}_2$	4,8	Нет

1.6. «Тонкая» структура основной поперечной волны

Проанализируем структуру основных ПВ, полученных в настоящих расчетах.

На рисунке 1.11 приведены результаты расчета для стехиометрической метано-воздушной смеси в канале шириной $a_0=H = 33$ см. Показан увеличенный фрагмент течения с основной поперечной волной ВВ, распространяющейся вверх по сильно возмущенной зоне индукции за лидирующим ударным фронтом ДВ. На фронте самой поперечной волны ВВ имеются поперечные ДВ (скачки с химической реакцией за фронтом), отмеченные цифрами 1-4. То есть ПВ имеет «тонкую» структуру, в которой ДВ распространяются по достаточно узкой зоне индукции за лидирующим

ударным фронтом ПВ. На рис. 1.13-1.17 аналогичные ДВ на фронте основных ПВ также обозначены цифрами. Рисунок 1.13 показывает существование «тонкой» структуры ПВ в богатой метано-воздушной смеси [46, 47]. «Тонкая» структура ПВ получена и в стехиометрической метано-кислородной смеси $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$ (рис. 1.14, $H = 0,35$ см). Расчеты детонации в этой смеси с увеличенным пространственным разрешением, то есть с удвоенным количеством расчетных ячеек по каждой оси, показали наличие многофронтной структуры даже для ПВ более низшего порядка. Так, на рис. 1.15 показана многофронтная (ячеистая) структура фронта третичной ПВ, обозначенной как а'а'.

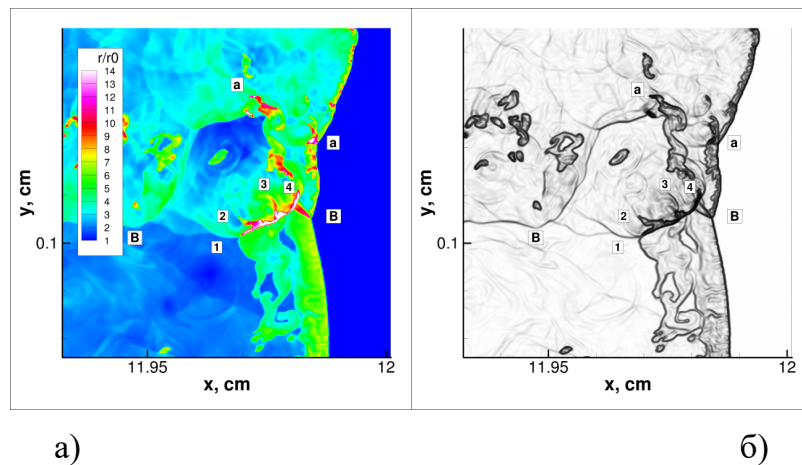


Рис. 1.14. Увеличенный фрагмент структуры фронта основной поперечной волны ВВ в стехиометрической метано-кислородной смеси $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$,

$$H = 0,35 \text{ см}, x_{fr} = 12 \text{ см}.$$

а) относительная плотность; б) шпирен.

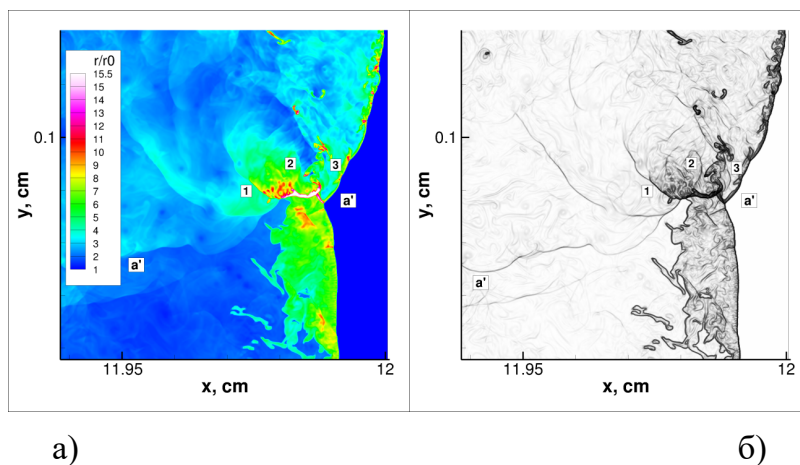


Рис. 1.15. Увеличенный фрагмент структуры фронта третичной ПВ а'а' в стехиометрической метано-кислородной смеси $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$, $H = 0,35$ см, $x_{fr} = 12$ см, расчет с повышенным разрешением.

а) относительная плотность; б) шпирен.

Для двухтопливной метано-водородной смеси с воздухом при $\alpha = 0,6$ численные эксперименты также показывают наличие «тонкой структуры» ПВ, причем это фиксируется при разных значениях ширины канала. Увеличенные фрагменты структуры фронта основных ПВ показаны на рис. 1.16 при $a_0 = H = 7$ см и рис. 1.17 при $H = 7,5$ см. Полные поля течений показаны на рис. 1.1 и 1.3 соответственно. Поперечные волны 1, 2, 3, etc. «тонкой» структуры являются детонационными волнами, как и ПВ в однотопливных метановых смесях на рис. 1.12–1.15.

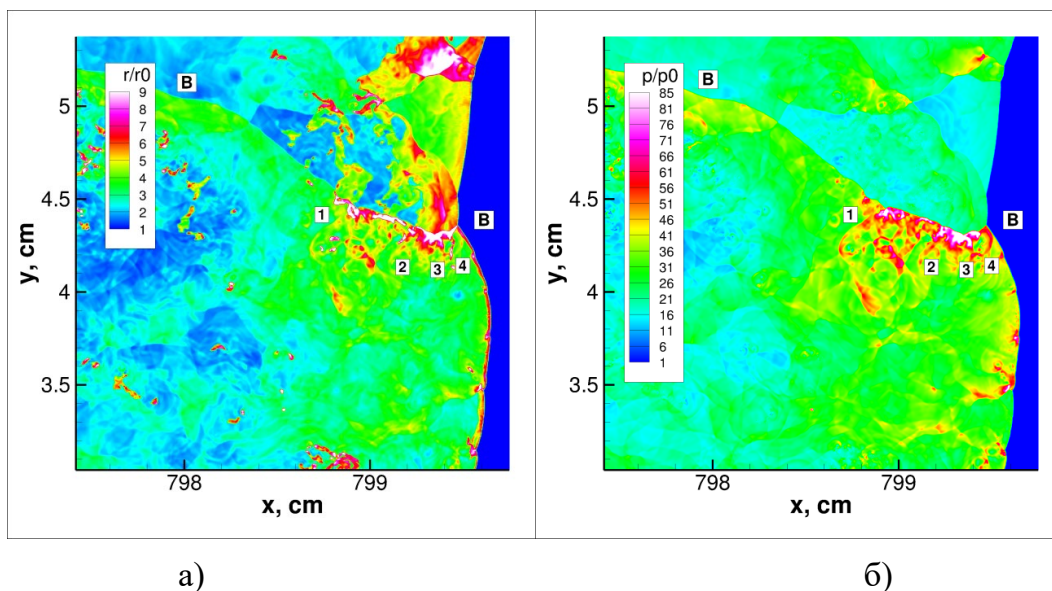


Рис. 1.16. Увеличенный фрагмент структуры фронта поперечной волны ВВ в смеси $0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1,1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0,6$, $a_0=H=7$ см, $x_{fr}=800$ см (см. рис. 1.1).

а) относительная плотность; б) относительное давление.

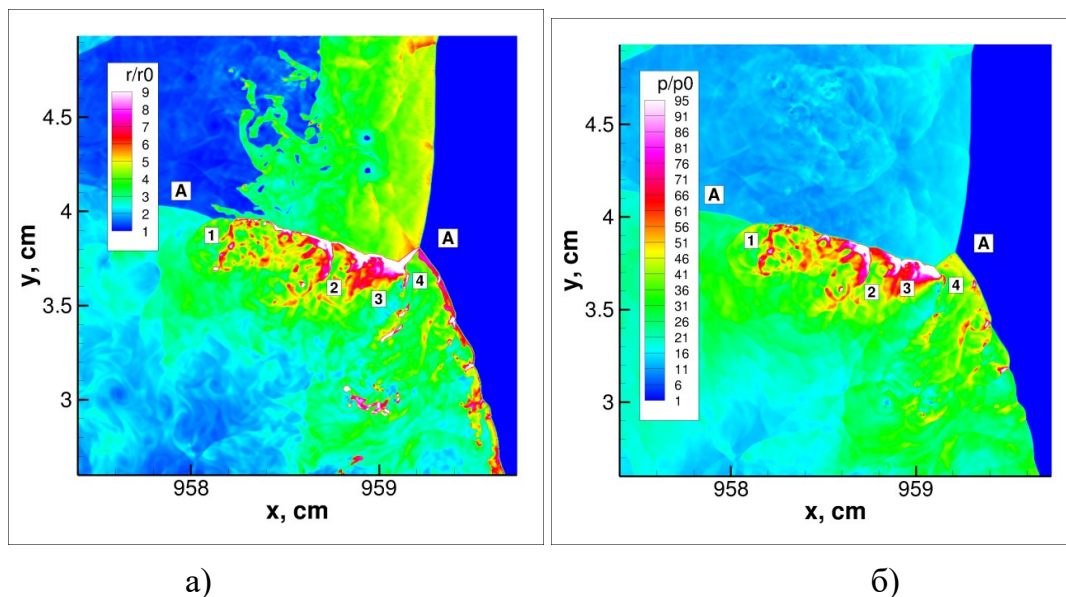


Рис. 1.17. Увеличенный фрагмент структуры фронта поперечной волны АА в смеси $0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1,1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0,6$, $H=7,5$ см, $x_{fr}=960$ см (см. рис. 1.3).

а) относительная плотность; б) относительное давление.

На рис. 1.18 показан увеличенный фрагмент структуры фронта поперечной волны в двухтопливной смеси при $\alpha = 0,8$, представленный на рис. 1.6. Видно, что она имеет «тонкую» структуру. При этом, поперечные волны за основной ПВ, обозначенные цифрами, являются ударными волнами. То есть нереагирующими скачками в очень широкой и сильно возмущённой зоне индукции. Соответственно, имеется принципиальное отличие от «тонкой» структуры основной ПВ в однотопливных метановых смесях и двухтопливной метано-водородной смеси при $\alpha = 0,6$ (см. выше), состоящей из детонационных волн. Таким образом, по мере увеличения процента водорода в двухтопливной метано-водородной смеси растёт ширина зоны индукции за фронтом основной ПВ, увеличиваются неоднородности течения в ней, и происходит вырождение детонационных волн в ударные скачки.

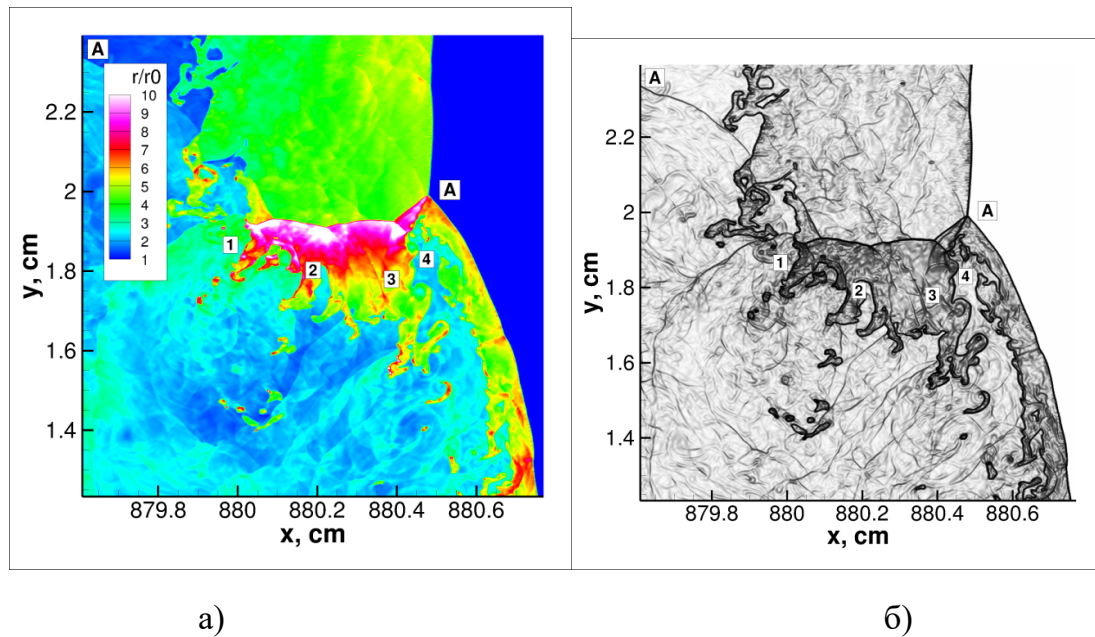


Рис. 1.18. Увеличенный фрагмент структуры фронта поперечной волны АА в смеси $0,8\text{H}_2 + 0,2\text{CH}_4 + 0,8(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0,8$, $H=3,25$ см, $x_{fj}=881$ см (см. рис. 1.6).

а) относительная плотность; б) шпирен.

Для однопаливной водородной смеси (см. рис. 1.9) наличие «тонкой структуры» ПВ в данном численном моделировании не зафиксировано, что коррелирует с экспериментальными наблюдениями. Хотя в данных расчетах время от времени для этой смеси фиксируются спорадическое возникновение нестационарных возмущений в зоне индукции за основной ПВ. Например, на рис. 1.9 заметен слабый скачок на фронте волны ВВ при $u \approx 0,65$ см. Еще раз отметим, что повышение доли водорода в двухтопливной смеси не приводит к изменению степени регулярности основной многофронтной (ячеистой) структуры ДВ, в отличие от влияния этого параметра на «тонкую структуру» основных ПВ.

К настоящему моменту ни эмпирический, ни теоретический критерий возникновения «тонкой структуры» ПВ не предложены. Анализируя полученные результаты по двумерной структуре ДВ в исследованных смесях, можно выдвинуть обобщающее предположение, что если у ДВ имеется «тонкая» структура переднего фронта ДВ, то очень вероятно, что будет существовать и «тонкая структура» у основных ПВ на ее фронте.

Выводы

Представлена обобщенная двустадийная модель кинетики детонационного сгорания бинарной стехиометрической метано-водородной смеси.

Модель физически обоснована, не содержит произвола в выборе констант, соответствует второму началу термодинамики и принципу Ле Шателье. Она проста (содержит алгебраические формулы и только два обыкновенных дифференциальных уравнения для расчета периода индукции и молярной массы газа). В силу своей простоты и высокой точ-

ности модель является определенной альтернативой детальной кинетике при расчете сложных детонационных течений и технических приложений газовой детонации.

Предлагаемая модель работает только для многофронтной ДВ. В то же время известные детальные кинетические схемы для рассматриваемой двухтопливной смеси (да и многих других) систематически не проверены именно на численных двумерных расчетах ДВ. Причина этого кроется в громоздкости детальной кинетики (многие тысячи элементарных стадий). Имеется и проблема выбора огромного числа констант. Необходимо выполнить огромный объем вычислений при решении громоздкой системы жестких дифференциальных уравнений, описывающих газодинамическое течение с химическими реакциями и высокими пространственными и временными градиентами. Поэтому детальная кинетика для проверки предлагаемой модели пока не годится. Приведем пример. Реакция горения водорода намного проще, чем реакция горения двухтопливной метано-водородной смеси (лишь десятки элементарных стадий). Кинетические схемы (и соответствующие кинетические константы) для реакции горения водорода хорошо известны и проверены на расчетах пламен и периодов индукции позади ударных волн. С другой стороны, они могут приводить к существенным ошибкам в расчетах размера детонационной ячейки [48, 49]. Естественно, в будущем появятся детальные кинетические схемы, систематически верифицированные в рамках численного моделирования многофронтных детонационных структур. Тогда сравнение обобщенной кинетической модели с детальными кинетическими схемами будет более обоснованным.

Проведено численное двумерное моделирование многофронтной ДВ в рассматриваемой бинарной смеси. Рассмотрен весь диапазон соотноше-

ний между горючими. Расчет химического превращения производился по предложенной кинетической модели. Рассчитанный размер детонационной ячейки и качественная нерегулярная структура ДВ хорошо соответствуют эксперименту. Рассмотрена динамика структуры ДВ при изменении соотношения между горючими. Показано, что она может иметь немонотонный характер.

В расчетах получены «тонкие» структуры переднего детонационного фронта в рассматриваемой двухтопливной смеси. Численными расчетами подтверждена обоснованность известного экспериментального критерия для определения существования или отсутствия таких структур.

Впервые выполнен расчет многофронтной структуры ДВ в богатой метано-воздушной смеси.

Впервые показана возможность существования «тонкой» структуры основных поперечных волн в бинарной стехиометрической метано-водородной смеси, формируемой набором скачков с химическими превращениями. Получено, что они могут деградировать в систему ударных скачков при изменении концентрации реагирующих компонент. На примере богатой метано-воздушной однотопливной смеси показано, что «тонкая» структура может существовать и у вторичных поперечных волн.

В настоящий момент у нас нет физического объяснения полученного здесь впервые эффекта немонотонного влияния содержания водорода на степень регулярности многофронтной структуры. Нужны дополнительные экспериментальные и теоретические исследования эволюции ячейистой структуры детонационной волны в рассматриваемой двухтопливной смеси при $\alpha \rightarrow 0$.

Выдвинутое в настоящей работе предположение о корреляции между «тонкой» структурой переднего фронта и «тонкой» структурой попе-

речных волн основано на представленных выше численных экспериментах в рассматриваемой двухтопливной смеси и анализе экспериментальных результатов о структуре фронта ДВ для однотопливных смесей. Данное предположение, безусловно, должно быть в дальнейшем подтверждено (или скорректировано) экспериментальными исследованиями и численными расчетами.

Физические причины формирования «тонкой» структуры переднего ударного фронта известны и связаны с высокой энергией активации ведущей химической реакции. Физические причины формирования «тонкой» структуры поперечных волн, по-видимому, аналогичны. При этом следует иметь в виду, что экспериментов по исследованию «тонкой» структуры поперечных волн чрезвычайно мало, а соответствующих теоретических исследований нет совсем. Взаимосвязь между возникновением этих двух типов «тонких» структур ни теоретически, ни экспериментально не исследована.

В порядке дискуссии о корреляции между «тонкими» структурами отметим, что нам не известны примеры смесей с «тонкой» структурой ведущего фронта ДВ и гладкими основными поперечными волнами. Возможно, они и существуют, тогда выдвинутое предположение должно быть скорректировано. Например, указаны границы параметра Z . Возможно, существуют смеси с гладким фронтом ДВ и с тонкой структурой основных поперечных волн. Например, известно, что стехиометрические водородные смеси не имеют тонкой структуры переднего фронта, при этом кислородные смеси имеют регулярную ячеистую структуру ДВ (все детонационные ячейки одинакового размера), а воздушные смеси имеют нерегулярную структуру (на фронте могут быть ячейки разного размера). При этом в работе [34] экспериментально обнаружено, что

вращающаяся поперечная волна в спиновой детонации в смеси $2\text{H}_2+\text{O}_2$ находится на границе устойчивости, периодически на ней возникают возмущения. Однако эти скачки не являются реагирующими. Наше предположение не находится в противоречии с фактом существования таких смесей. Просто это означает, что область существования поперечных волн с «тонкой» структурой может быть немного больше, чем область реализации «тонкой» структуры ведущего фронта ДВ.

Наконец, мы не можем однозначно утверждать, что наш вывод о корреляции между тонкой структурой переднего фронта и тонкой структурой поперечных волн будет справедлив также и для нестехиометрических многотопливных смесей. Нужны соответствующие дополнительные экспериментальные и теоретические исследования нестехиометрических составов.

Предлагаемая модель кинетики в силу своих достоинств наверняка будет использована для моделирования вращающихся ДВ. Так, в нашей работе [50] выполнен численный двумерный расчет вращающейся ДВ в метане. При этом использована обобщенная модель кинетики [6,7]. Именно эта модель в рамках настоящей работы расширена на двухтопливную смесь $\text{C}\text{H}_4\text{-H}_2$. Добавим, что в нашей работе [51] выполнено численное двумерное моделирование вращающейся детонации в двухтопливной [CO-H_2 (синтез-газ)] смеси. При этом использована обобщенная модель кинетики, которая является одной из промежуточных версий предлагаемой в настоящей статье модели кинетики для $\text{C}\text{H}_4\text{-H}_2$.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ В СТЕХИОМЕТРИЧЕСКОЙ БИНАРНОЙ СМЕСИ СО/Н₂/ОКИСЛИТЕЛЬ

2.1. Введение

Окончательного выбора горючего (или линейки горючих) для реактивных двигателей на вращающейся детонации до сих пор не сделано. К числу многообещающих горючих компонентов для таких целей принадлежит бинарная смесь СО и Н₂ различной стехиометрии (синтез-газ) [52]. Она имеет хорошие перспективы и в производстве тепло- и электроэнергии, и в химической промышленности. С каждым годом область применения синтез-газа непрерывно расширяется. Для примера можно привести так называемую «пушку Фролова», в которой продукты газовой детонации их ствола циклической детонационной установки подаются в химический реактор, в котором находятся органические отходы. Утилизации отходов осуществляется смесью окиси углерода и ультраперегретого в волне газовой детонации пара. Циклический процесс работы реактора обеспечивается детонацией синтез-газа, возобновляемого в процессе работы установки.

Для расчета параметров и габаритов двигателей и реакторов для утилизации отходов, основанных на детонационном сжигании синтез-газа, равно как и для обеспечения взрывобезопасности при его использовании, хранении и транспортировке, необходимо выполнить численное моделирование ячеистой структуры ДВ при различных соотношениях между горючими компонентами. До сих пор подобные расчеты выполнены не были и сделаны нами впервые. Результаты расчетов будут представлены в настоящей Главе.

Синтез-газ состоит из компонент с принципиально различными детонационными свойствами. Достаточно вспомнить непреодолимые проблемы при попытках получения самоподдерживающейся ДВ в смеси СО с воздухом. Напротив, водород, с точки зрения детонационной опасности, занимает место в первых рядах. Ячеистая детонационная структура в водородо-воздушных смесях регулярна. В то же время в бинарной стехиометрической смеси синтез-газа с воздухом при увеличении содержания СО регулярная ячеистая структура трансформируется в нерегулярную [53]. Это неудивительно в силу существенной разницы энергии активации для расчета периода индукции в смеси СО-воздух (обязательно в присутствии небольших добавок промотора, иначе детонация не пойдет) и водородо-воздушной смеси [53, 54]. Для синтез-газа эта величина существенно выше. Поэтому и в численных расчетах параметров и ячеистой структуры ДВ в рассматриваемой бинарной смеси детонационная структура также должна эволюционировать из регулярной в нерегулярную при увеличении относительной концентрации окиси углерода.

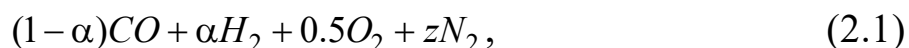
Неотъемлемой составной частью численного моделирования параметров и структуры ДВ является расчет химических превращений. К сожалению, необходимость проведения большого объема математических вычислений, проблемы выбора наиболее адекватной реальности кинетической схемы и поиска кинетических констант, существенно затрудняют, а порой и делают невозможным использование детальной кинетики для численного моделирования газовой детонации. Особенно это касается углеводородных смесей со сложным механизмом, насчитывающим многие сотни и тысячи реакций. Более того, как правило, имеющиеся в литературе кинетические схемы не верифицированы именно на задачах расчета многофронтных детонационных структур. На данный момент сделано относительно небольшое число работ, в которых дву-

мерные расчеты ДВ выполнены с привлечением детальной кинетики (например, [55, 56]). Поэтому в численное моделирование многофронтной газовой детонации в газовых углеводородосодержащих смесях до сих пор широко используются обобщенные кинетические модели (например, [56]). В рамках моделей внутренняя энергия, молярная масса, показатель адиабаты смеси, и тепловой эффект реакции вычисляются без расчета детального химического состава смеси и решения громоздкой жесткой системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Это упрощает кинетические расчеты и значительно сокращает их объем.

В настоящей главе будет изложена простая и физически обоснованная обобщенная модель химической кинетики детонационного сгорания бинарной смеси синтез-газа с окислителем. Ее верификация будет выполнена на двумерном численном моделировании ячеистых детонационных структур.

2.2. Обобщенная модель кинетики детонационного горения синтез-газа

Рассмотрим стехиометрическую бинарную смесь синтез-газа с окислителем:



при $z = 0$ окислитель – кислород, при $z = 1,88$ – воздух. При разработке обобщенной модели кинетики для нее воспользуемся моделью кинетики для метана [6, 7], которая, в свою очередь, получена из кинетической модели [35] для водорода.

Реакция считается двустадийной и состоящей из стадии (периода, зоны) индукции, которая сменяется стадией (периодом, зоной) основного тепловыделения.

В практике экспериментального измерения периода индукции при высоких давлениях и температурах используются отраженные ударные волны, параметры течения за которыми постоянны. На основе полученных в таких экспериментах данных выводятся аррениусовские формулы и верифицируются детальные кинетические механизмы и соответствующие константы для расчета периода индукции. В то же время, за фронтом ДВ течение непостоянно и в пространстве, и во времени. В рамках предлагаемой обобщенной модели полагается, что период индукции истекает в момент времени, когда:

$$Y(t) = \int_0^1 \frac{dt}{\tau_{\Sigma}} = 1,$$

где $\tau_{\Sigma} = \tau_{\Sigma}(\rho, T)$ – период индукции при постоянных параметрах (плотности ρ и температуре T), для параметра индукции Y – параметр индукции. Этот критерий широко используется для численного моделирования многофронтной газовой детонации (см., например, [3, 36]). Аналогичный критерий использован в выше для смеси $\text{CH}_4\text{-H}_2$ (глава 1, формула (1.2)). Он учитывает наличие градиентов по времени и пространству поля течения смеси за фронтом волны. Таким образом, система уравнений Эйлера дополнялась дифференциальным аналогом рассматриваемого критерия:

$$\frac{\partial \rho Y}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Y}{\partial x} + \frac{\partial \rho v Y}{\partial y} = \frac{\rho}{\tau_{\Sigma}},$$

где u, v – компоненты скорости в направлении осей x и y соответственно, t – время, ρ – плотность, $Y = 0$ при $t = 0$. При $Y = 1$ в данной расчетной ячейке период индукции завершается. Аналогичная процедура использована в главе 1 для смеси $\text{CH}_4\text{-H}_2$.

Для расчета периода индукции в одно-топливных смесях СО с кислородом и воздухом при нормальных начальных условиях перед передним фронтом волны будет использована формула [57]:

$$\tau_{iCO} = \frac{A_{CO} e^{E_{CO}/RT}}{[O_2]},$$

$[O_2]$ – концентрация кислорода, R – универсальная газовая постоянная, T – температура. Константы (система СГС) равны: $A_{CO} = 1,38 \cdot 10^{-14}$, $E_{CO}/R = 15098$. При использовании данной формулы следует иметь в виду, что, как отмечено выше, для существования ДВ в смеси СО воздухом необходимы небольшие промотирующие добавки, например, водорода [53, 58].

Для расчета периода индукции в стехиометрической водородо-воздушной смеси при нормальных начальных условиях перед волной предлагаем использовать формулу, аналогичную [59]:

$$\tau_{iH_2} = \frac{A_{H_2} e^{E_{H_2}/RT}}{[O_2]} \cdot \frac{2[H_2] + [O_2] + z[N_2]}{2[H_2] + [O_2]},$$

$A_{H_2} = 12,1 \cdot 10^{-14}$, $E_{H_2}/R = 8631$. Здесь $[O_2]$, $[H_2]$, $[N_2]$ – концентрации O_2 , H_2 и N_2 в смеси. Хорошую точность данной формулы можно подтвердить на расчете размера детонационной ячейки a_0 по известной алгебраической модели Васильева-Николаева [3]. Например, для стехиометрической водородо-воздушной смеси получим 1,4 см, что хорошо соответствует эксперименту (1,5 см [21]).

Для расчета τ_{Σ} в (2.1) воспользуемся [60]. Согласно этой работе, расчет периода индукции в многотопливных (в том числе и бинарных) смесях можно производить по формулам, представляющим собой некоторые алгебраические комбинации аррениусовских выражений для рас-

чета периода индукции отдельных горючих компонент. Если концентрация одного из горючих бинарной смеси стремится к нулю, искомая формула для периода индукции должна не иметь сингулярностей и трансформироваться в формулу для расчета периода индукции другого горючего.

Рассмотрим рис. 2.1, где приведены значения a_0 для (2.1) (в том числе и при $\alpha = 1$) из экспериментов [53, 21]. Видно, что резкое падение a_0 при увеличении α от нуля сменяется более плавным. Примем во внимание, что a_0 пропорционально величине периода индукции за фронтом ДВ [3]. Учтем вид приведенных выше формул для τ_{iCO} и τ_{iH_2} . В результате предложим следующую формулу для (2.1):

$$\tau_{\Sigma} = \frac{A_{\Sigma} e^{E_{\Sigma}/RT}}{[O_2]}, \quad (2.2)$$

$$A_{\Sigma} = A_{CO} e^{-k\alpha} (1 - \alpha) + A_{H_2} (1 - e^{-k\alpha} (1 - \alpha)), \quad (2.3)$$

$$E_{\Sigma} = E_{CO} e^{-k\alpha} (1 - \alpha) + E_{H_2} (1 - e^{-k\alpha} (1 - \alpha)). \quad (2.4)$$

При $\alpha = 0$ и $\alpha = 1$ величины A_{Σ} и E_{Σ} равны значениям для CO и H₂. При достаточно большой величине константы k произойдет резкий экспоненциальный переход величин A_{Σ} и E_{Σ} от значений для смеси CO с воздухом к значениям для водородо-воздушной смеси. Расчет a_0 по формуле [3], если принять зависимости (2.3), (2.4) справедливыми и положить $k = 13$, дает значение, максимально хорошо соответствующее эксперименту (рис. 2.1).

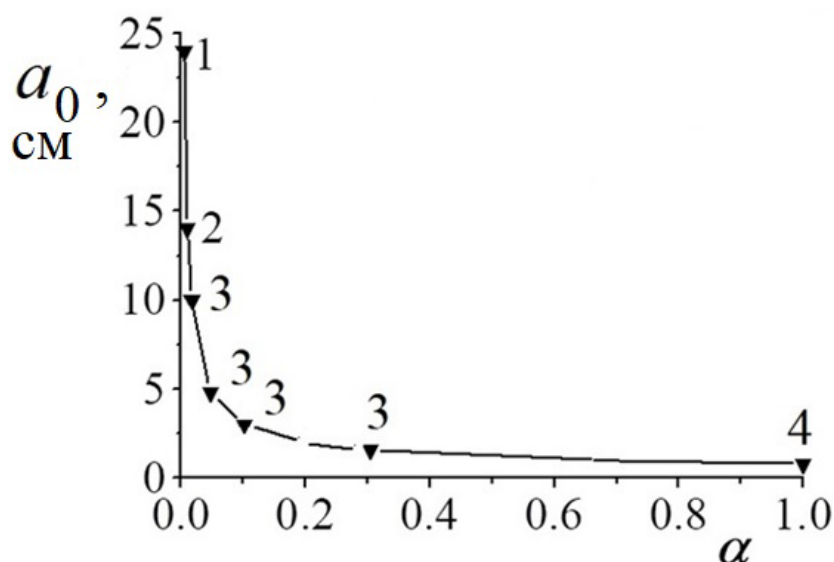


Рис. 2.1. Размер детонационной ячейки в смеси $(1-\alpha)CO + \alpha H_2 + 0,5(O_2 + 3,76N_2)$.

1-3 – эксперимент [53], 4 – эксперимент [21].

Левее точки 1 детонации нет. Точка 2 – предел существования стационарного самоподдерживающегося режима.

Положим, что в зоне индукции ДВ в смеси (2.1) химические превращения отсутствуют. Это означает, что химический состав смеси фиксирован, и, соответственно, его молярная масса μ постоянна и равна своему начальному значению μ_0 , а теплового эффекта реакции Q нет:

$$\mu = \mu_0 = const, \quad Q = 0. \quad (2.5)$$

Одномерный расчет параметров течения за фронтом ударной волны в синтез-газе [61], подтверждает разумность такого предположения. Получено, что в индукционной зоне изменением концентрации H_2 и CO можно пренебречь, как и концентрациями остальных химических компонентов.

Как и в [6, 7, 35] примем, что смесь (2.1) после истечения периода индукции (т. е. на стадии основного тепловыделения и при достижении состояния химического равновесия) состоит только из H , O , OH , H_2 , O_2 ,

H₂O, CO, CO₂, N₂. Расчеты химического состава синтез-газа при его нагружении ударной волной [61] и в состоянии химического равновесия при детонационных давлениях и температурах [43, 62] подтверждают разумность этого предположения. Но окончательный положительный вывод о работоспособности предлагаемой модели можно сформулировать только после ее успешной верификации в рамках численного моделирования многофронтной ДВ. Например, если расчеты a_0 и качественной структуры волны будут подтверждаться экспериментом.

Если смесь (2.1) после истечения периода индукции состоит из указанных компонент, то согласно [6, 7] дифференциальное кинетическое уравнение

$$\frac{d\mu}{dt} = 4K_+ \frac{\rho^2}{\mu} \left(1 - \frac{\mu}{\mu_{\max}}\right)^2 - AT^{3/4} (1 - e^{-\theta/T})^{3/2} \rho \left(\frac{\mu}{\mu_{\min}} - 1\right) e^{-E/RT}, \quad (2.6)$$

впервые предложенное в [35] для водородо-кислородных смесей, остается справедливым. Начальное условие для (2.6): $\mu = \mu_0$ (см. (2.5)). Кинетическое уравнение позволяет рассчитать μ в зоне основного тепловыделения вплоть до достижения смесью состояния химического равновесия. Здесь и далее T - температура, A и K_+ - обобщенные константы скоростей рекомбинации и диссоциации, θ - эффективная температура возбуждения колебательных степеней свободы молекул, E - средняя энергия диссоциации продуктов реакции, μ_{\min} , μ_{\max} - молярные массы смеси в предельно диссоциированном и предельно рекомбинированном состояниях. При $\mu = \mu_{\max}$ смесь может содержать только двух- и трехатомные молекулы CO, CO₂, O₂, H₂, N₂ и H₂O. При $\mu = \mu_{\min}$ смесь состоит из атомов, за исключением молекул CO и N₂, которые считаются не диссоциирующими.

Удельную внутреннюю энергию смеси U , ее термодинамическую U_{therm} и химическую U_{chem} части будем рассчитывать по явным алгебраическим формулам [6, 7, 35]:

$$U_{therm}(T, \mu) = \left[\frac{3}{4} \left(\frac{\mu}{\mu_a} + 1 \right) + \frac{3}{2} \left(\frac{\mu}{\mu_a} - 1 \right) \frac{\theta / T}{\exp(\theta / T) - 1} \right] \frac{RT}{\mu}, \quad (2.7)$$

$$U_{chem}(\mu) = E \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{min}} \right), \quad (2.8)$$

$$U(T, \mu) = U_{therm}(T, \mu) + U_{chem}(\mu). \quad (2.9)$$

Здесь μ_a - молярная масса смеси в атомарном состоянии, в котором смесь полностью атомизирована. В качестве начала отсчета U_{chem} выбрано предельно диссоциированное состояние.

Константы E , A , μ_a , μ_{min} , μ_{max} рассчитываются согласно [6, 7, 35].

Предлагаемая модель описывает и химическое равновесие. В этом случае кинетическое дифференциальное уравнение трансформируется в явное квадратное уравнение относительно μ (в состоянии химического равновесия $d\mu / dt = 0$). Оно имеет один физичный корень, лежащий между μ_{min} и μ_{max} . Формулы (2.7-2.9) при этом не меняются. Точность расчета химического равновесия по предложенной кинетической модели может быть продемонстрирована на расчете параметров волны Чепмена-Жуге (смесь в звуковой точке химически равновесна). Соответствующая система уравнений приведена в [35].

Тестовые расчеты параметров газа в точке Чепмена-Жуге и в пике Неймана для смеси (2.1) при $\alpha = 0$ (CO), $\alpha = 1$ (водород) и $\alpha = 0,1$, $\alpha = 0,3$ (синтез-газ) по предложенной обобщенной модели сравнивались с соответствующими расчетными данными, полученными с помощью известного онлайн термодинамического калькулятора CEARUN (NASA) [43], в котором используются уравнения детального химического равновесия.

Сравнение параметров волны показало, что вычисления по разработанной кинетической модели и по модели CEARUN дают близкие величины и различия не превышают нескольких процентов.

2.3. Результаты расчетов и обсуждение. «Тонкая» структура поперечной волны

Сделан расчет параметров и структуры ДВ в смеси (2.1) при нормальных начальных условиях для всего диапазона соотношения между горючими. Химические превращения моделировались предложенной обобщенной моделью. Используются двумерные нестационарные уравнения Эйлера, как и при моделировании детонации в H_2 [5], CH_4 [6, 7] и CH_4-H_2 (глава 1). Газ полагался идеальным.

Для инициирования ДВ, в квадратной области у закрытого конца канала мгновенно выделялась энергия. Соответственно, давление и температура скачкообразно увеличивались. Обеспечивалось заведомо сверхкритическое инициирование ДВ. Поиск критических условий инициирования не производился. Расчеты завершались, когда режим распространения волны становился в среднем стационарным.

Как и для смеси CH_4-H_2 (глава 1), величина a_0 определялась по известному алгоритму [45]. Моделировалась ДВ в плоском канале при изменении ширины канала H . Расчет начинался при H , заведомо (на порядок) превышающем размер ячейки. Число основных поперечных волн (ПВ), деленное пополам, показывало число ячеек, укладываемых внутри рассматриваемого канала. Соответственно, производилась предварительная оценка a_0 . После этого расчеты ДВ выполнялись для ширины канала, близкой к предварительно определенной величине a_0 . Эти расчеты выполнялись на более мелкой сетке. Если после выхода на самоподдерживающийся стационарный (в среднем) режим структура волны включает две основные максимально симметричные ПВ, движущие-

ся в противоположных направлениях, принималось, что $H = a_0$, Численные следовые отпечатки не строились.

Численное интегрирование системы уравнений осуществлялось на адаптивной движущейся в направлении распространения волны сетки с локальным сгущением вблизи переднего ударного фронта. По оси y использовалась равномерная расчетная сетка.

Общее число расчетных ячеек по оси x равнялось N_x . Неравномерная расчетная часть сетки по продольной координате содержала N_{x2} ячеек и охватывала течение между $x=0$ и равномерной частью сетки. Равномерная часть сдвигалась вместе с детонационной волной. Она захватывала поток с большими пространственными и временными градиентами в окрестности переднего детонационного фронта и содержала N_{x1} ячеек размером h_x . Для равномерной и неподвижной расчетной сетки по поперечной координате $h_y = H/N_y$, где h_y и H – размер ячейки и ширина канала, N_y – число ячеек. Большая часть расчетов выполнена для $N_x=2000$, $N_{x1}=1750$, $N_y=2000$ и $h_y=h_x$. Более подробно построение сеток описано в [7-9]. Следует обратить внимание на значительное число расчетных точек, что обеспечивало воспроизведение структуры волны с высокой точностью. Использование детальных кинетических схем при столь мелкой сетке было бы весьма и весьма затруднительно ввиду непреодолимого объема вычислений.

Полученная система уравнений решается численно с использованием разработанного кода на основе конечно-объемной схемы типа Годунова с MUSCL TVD реконструкцией четвертого порядка по пространству и усовершенствованного HLLC алгоритма для приближенного безитерационного решения задачи Римана. При реализации HLLC алгоритма для случая химически реагирующей смеси используется «метод релаксации энергии» Coquel-Perthame. Этот метод снимает проблему численного решения задачи Римана для среды со сложным

нелинейным уравнением состояния (в том числе с переменным соотношением теплоемкостей). Интегрирование по времени выполняется со вторым порядком точности с использованием аддитивных полунявных методов Рунге-Кутты. Все подробности о использованном алгоритме численного расчета и отдельных его составляющих можно найти в [6, 7, 35] и [63-70] соответственно.

Численный код параллелизовался в рамках подхода «domain decomposition». В данном исследовании основные расчеты были проведены на 256 процессорных ядрах, количество ядер ЦП по осям x и y составляло $N_{prx}=16$ и $N_{pry}=16$.

Исходя из имеющихся у авторов вычислительных возможностей, один расчет требовал 2-3 тысячи минут. Выход волны на стационар происходил на расстоянии $50\div 100$ калибров от места инициирования. Для вычисления a_0 выполнялось 3-4 и 6-8 итераций по H для регулярных и нерегулярных структур соответственно. Если изменить H в меньшую или большую стороны на величину, меньшую 0.1 от рассчитанной величины a_0 , число основных ПВ, движущихся навстречу и относительно симметричных, останется неизменным и равным двум. Выход за указанные границы ведет к принципиальной трансформации ячейки структуры. Симметрия между основными ПВ существенно нарушится, либо исчезнет одна из них, или образуются две, распространяющиеся в одном поперечном направлении. Такая динамика многофронтной структуры соответствует эксперименту. Итак, точность расчета a_0 не хуже десяти процентов. Максимальная неточность соответствует нерегулярным ячейкам.

Результаты расчета a_0 при вариации α приведены на рис. 2.2. Здесь же нанесены экспериментальные значения [53], которые показаны и на рис. 2.1. Значения $\alpha = 9,87 \cdot 10^{-3}$, 0,292% H_2 , $a_0 = 140$ мм, $\alpha = 0,1$,

2,96% H_2 , $a_0 = 25$ мм и $\alpha = 0,3$, 8.875% H_2 , $a_0 = 15$ мм относятся к первой-третьей (слева направо) расчетным точкам. Видно, что результаты расчета и эксперимента близки, в том числе и при значении $\alpha = 1$, для которого a_0 равно 1,4 см (расчет) или 1,5 см (эксперимент [21]).

На рис. 2.3-2.5 приведены рассчитанные многофронтные структуры ДВ, γ – плотность, индекс 0 соответствует начальному значению. Показаны численный шлирен течения и пространственные распределения γ/γ_0 и температуры. Рис. 2.4 и 2.5 относятся к нижней и средней расчетным точкам на рис. 2.2.

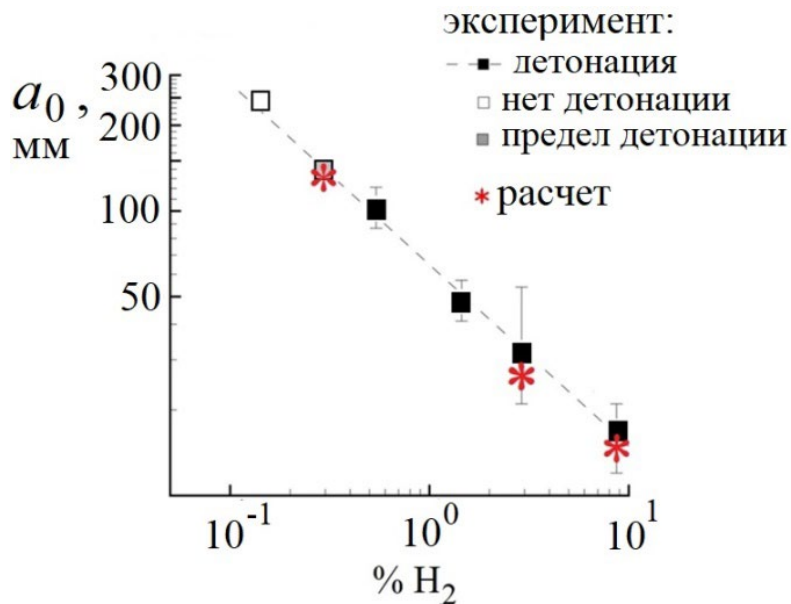


Рис. 2.2. Размер ячейки в смеси $(1-\alpha)CO + \alpha H_2 + 0,5(O_2 + 3,76N_2)$. Расчетные и экспериментальные [53] значения.

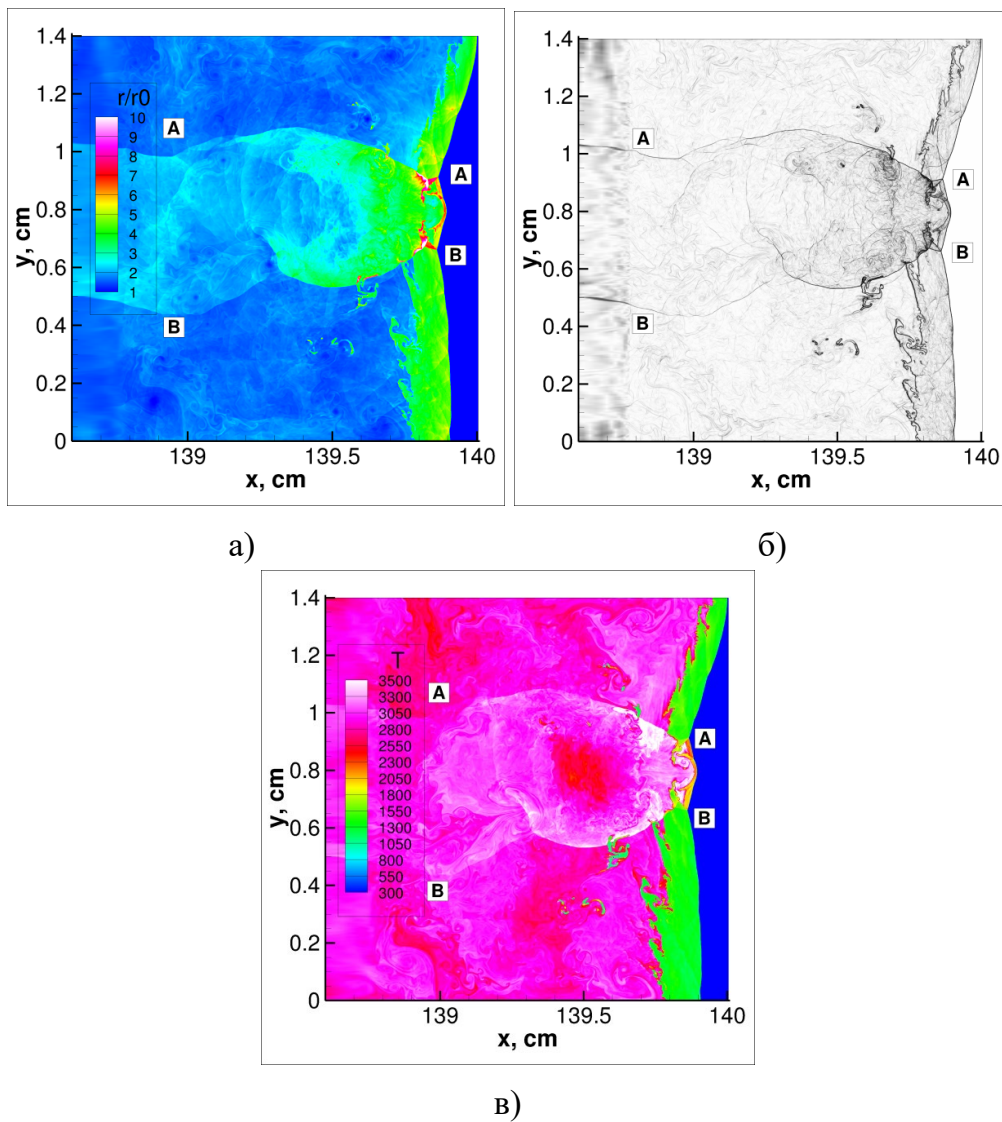


Рис. 2.3. Структура ДВ. Стехиометрическая водородо-воздушная смесь ($\alpha = 1$).

а) относительная плотность, б) шпирен,
 в) T , К. АА и ВВ – основные поперечные волны. $H = a = 1,4$ см.
 Эксперимент: $a = 1,5$ см [21].

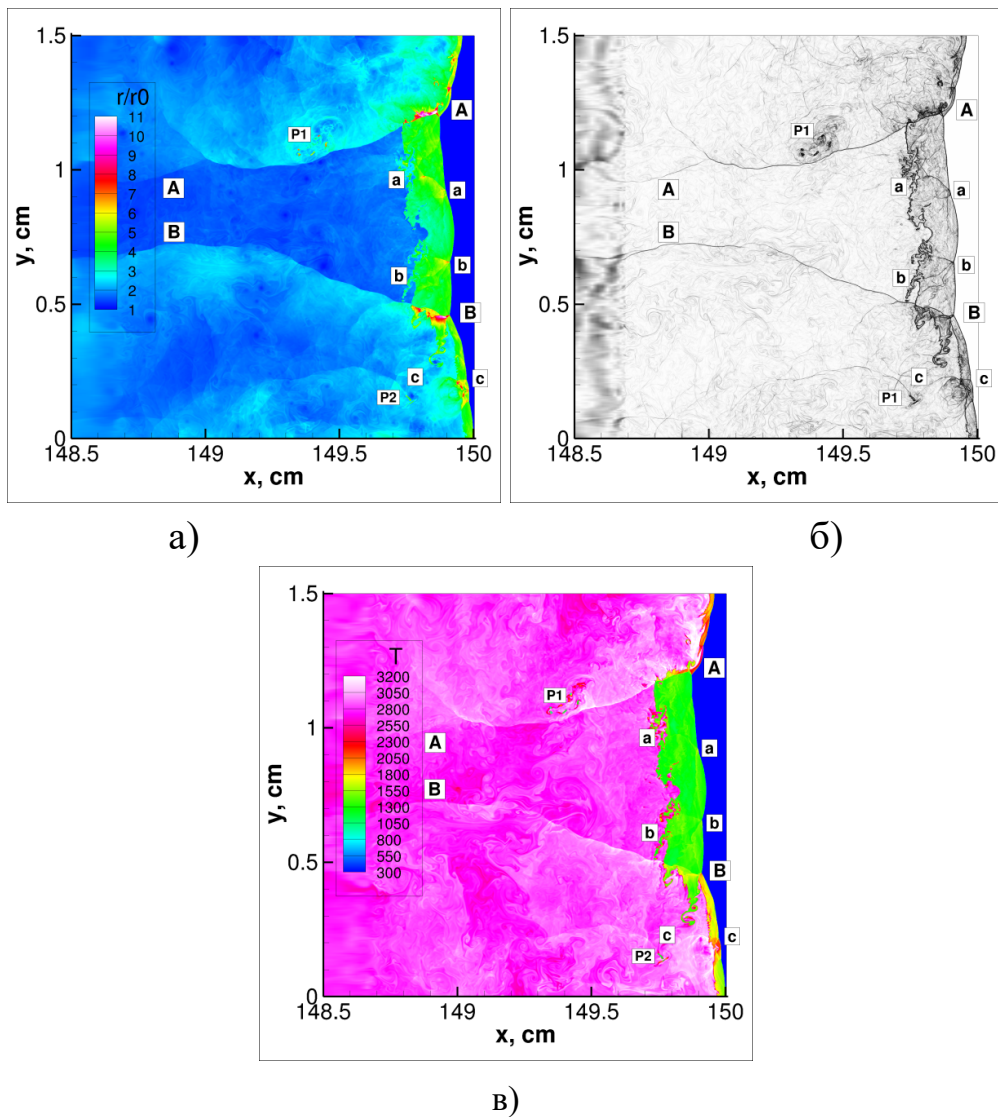


Рис. 2.4. Структура ДВ. Смесь $0,7CO + 0,3H_2 + 0,5(O_2 + 3,76N_2)$.
а) относительная плотность, б) шлирен,
в) T , К. AA и BB – основные поперечные волны.
aa, bb, cc – вторичные поперечные волны. P1, P2 – области несгоревшего газа.
 $H = a = 1,5$ см. Эксперимент: $a = 1,1 \div 2,0$ см [53].

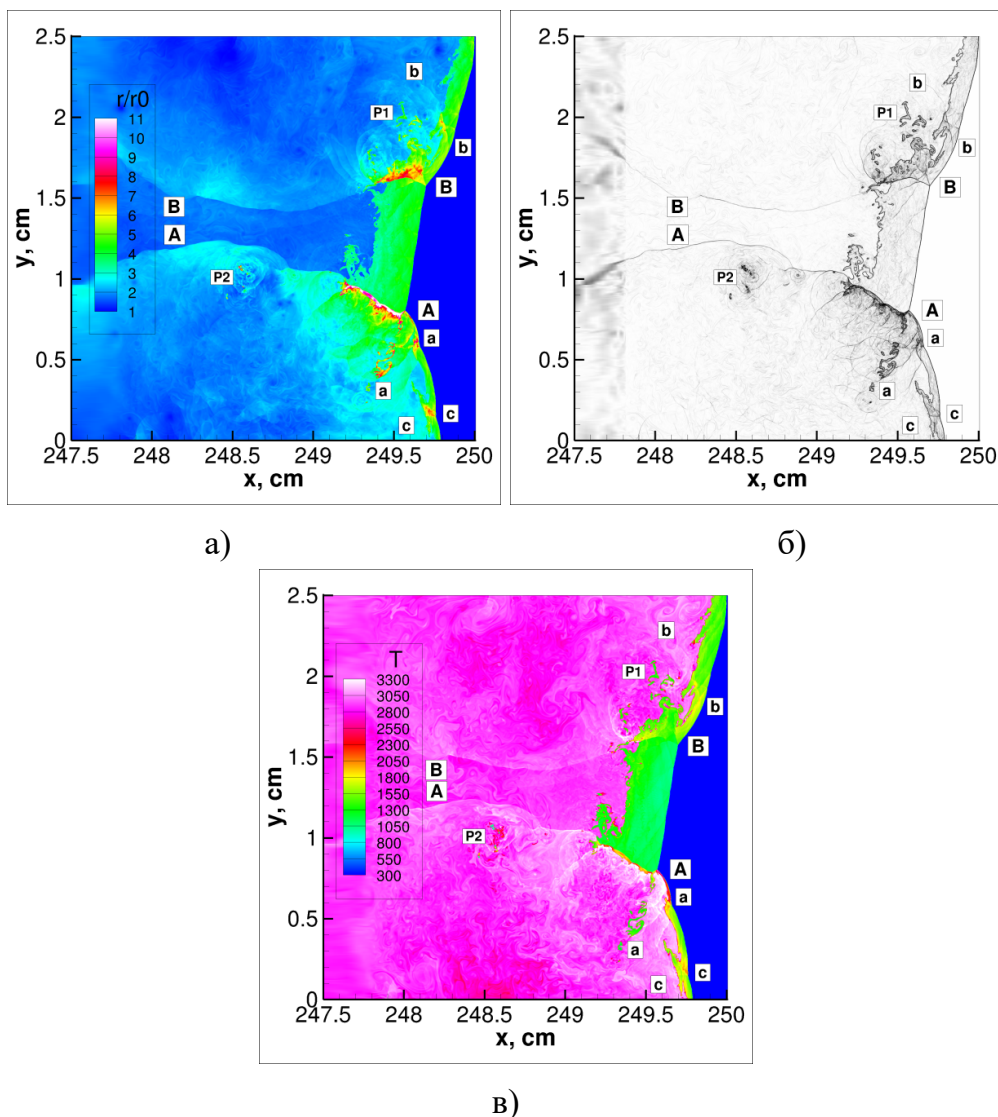


Рис. 2.5. Структура ДВ. Смесь $0,9CO + 0,1H_2 + 0,5(O_2 + 3,76N_2)$.

а) – относительная плотность, б) шлирен,

в) T , К. AA и BB – основные поперечные волны.

aa, bb, cc – вторичные поперечные волны. P1, P2 – области несгоревшего газа. $H = a = 2,5$ см. Эксперимент: $a = 2,0 \div 4,0$ см [53].

Структура ДВ в водородо-воздушной смеси (концентрация CO в (2.1) равна нулю) регулярна (рис. 2.3). На переднем ударном фронте ДВ присутствуют две движущиеся в противоположных направлениях симметричных ПВ. Увеличение содержания CO (сравним рис. 2.3–2.5) приводит к эволюции детонационной структуры. Она из регулярной становится нерегулярной. Основные ПВ уже менее согласованы между собой. Возникают области, газ

в которых, в отличие от окружающей среды, еще не прореагировал. На лидирующем ударном фронте ДВ присутствуют вторичные ПВ (см. рис. 2.4, 2.5). Все это наблюдается и в эксперименте [53].

Из рис. 2.5 видно, что имеет место «тонкая» структура ПВ. Подобное свойственно смесям при увеличении содержания CO в смеси. ПВ при этом является многофронтной ДВ, (волна AA на рис. 2.5).

На рис. 2.6 приведен пробный расчет ДВ в стехиометрической смеси синтез-газа с воздухом и парами воды, $H=25$ см. Масса паров воды в смеси равна 50%. Представленная выше модель кинетики без проблем расширяется и на случай добавки в (2.1) воды, которую можно рассматривать как инертный разбавитель. Все формулы модели остаются без изменения. Изменяются лишь количественные значения констант μ_a , μ_{min} , μ_{max} и A . На рис. 2.6 видна система ПВ на фронте, основные из них обозначены AA, BB и CC. Виден незначительный скачок температуры за фронтами этих ПВ. Реакция тепловыделения за ПВ отсутствует. То есть расчет, показанный на рис. 2.6 соответствует нестационарной пересжатой, и при этом затухающей ДВ по мере ее движения по каналу. По-видимому, ПВ на лидирующем фронте ДВ со временем деградируют в акустические волны. Отметим и очень возмущенную и протяженную зону индукции за фронтом головной ударной волны.

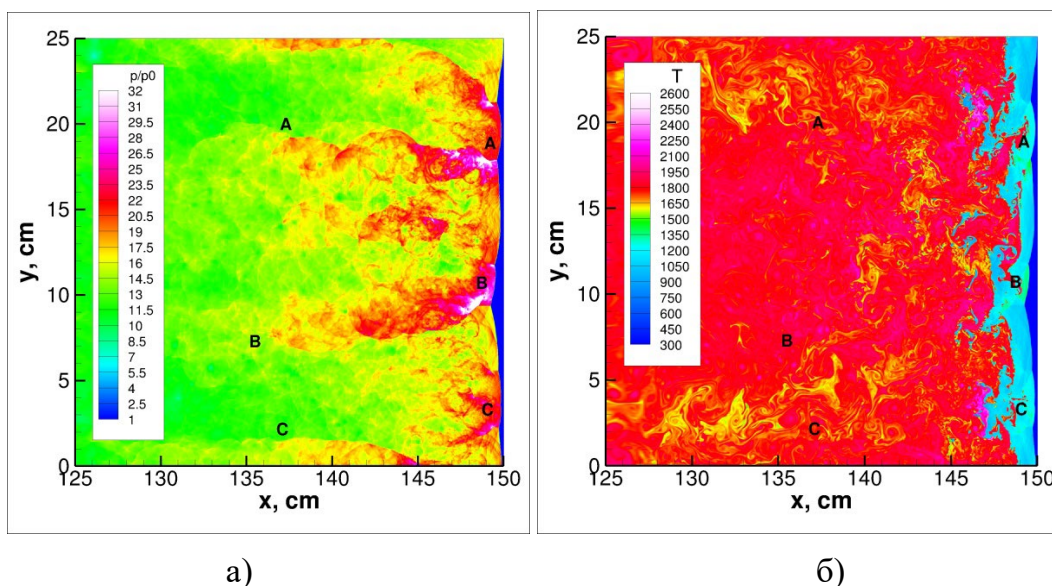


Рис. 2.6. Структура ДВ в смеси
 $0,9 \text{ CO} + 0,1 \text{ H}_2 + 0,5(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2) + 5,25 \text{ H}_2\text{O}$,
 вода в виде пара при $x_{fr}=150$ см:
 а) – относительное давление, б) T , К.

2.4. Заключение по второй главе

1. Представлена обобщенная модель кинетики для синтез-газа.

2. Модель верифицирована на численном расчете многофронтной ДВ. Размер ячейки и эволюции структуры волны при изменении соотношения между CH_4 и H_2 хорошо соответствуют эксперименту. Увеличение содержания H_2 сопровождается монотонной регуляризацией структуры волны.

3. В расчетах получена «тонкая» структура поперечной волны.

Можно сделать те же замечания о достоинствах предложенной модели кинетики и ее соответствия детальной кинетике, что и для модели кинетики для метано-водородной смеси (предложенной в главе 1). Структуры моделей аналогичны с той лишь разницей, что модель для синтез-газа проще, поскольку в индукционной стадии химических превращений нет.

В настоящее время еще не получены ответы на вопросы о том, как «тонкая» структура ДВ зависит от начальных условий и каким образом

наличие «тонкой» структуры ДВ может быть использовано в практических приложениях газовой детонации.

Совокупность достоинств модели позволяет рассчитывать на ее широкое использование при моделировании сложных детонационных течений в пространстве сложной геометрии и расчете параметров технических устройствах (прежде всего детонационных двигателей и установок по детонационно-газовой утилизации органических отходов).

3. STUDY OF THE DETONATION CELLULAR STRUCTURE IN A METHANE–HYDROGEN DUAL-FUEL MIXTURE

3.1. Introduction

Interest in the detonation of CH₄/H₂/air dual-fuel gas mixtures is largely associated with the development of continuous detonation engines [1, 2]. Their development and optimization are impossible without numerical calculations of the multifront structure of the detonation wave (DW), including the calculation of the transverse size of the detonation cell a_0 - one of the main parameters characterizing the detonation properties of gas mixtures [3].

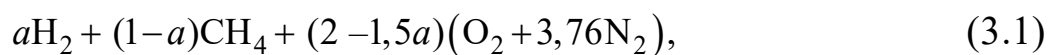
An estimate of the detonation cell size in a CH₄-H₂ dual-fuel mixture was made in [4] using algebraic formula given in [3]. However, a two-dimensional numerical calculation of the DW parameters and cellular structure in a methane–hydrogen dual-fuel mixture with different ratios of the fuels has not yet been carried out. The two-dimensional calculations available in the literature are limited to hydrogen–air and methane–air single-fuel mixtures (see, e.g., [5–7]). This constrains the calculation of the parameters of a continuous detonation engine using this dual-fuel mixture.

Numerical simulation of the DW parameters and structure is impossible without describing chemical transformations. The large number of kinetic constants, the problem of their verification based on calculations of detonation structures, and significant amounts of kinetic calculations are a serious obstacle to the use of detailed kinetic schemes for numerical simulation of detonation waves in hydrocarbon–air gas mixtures. Therefore, although the number of numerical studies of gas detonation using detailed kinetics is in-

creasing (e.g., [8–11]), generalized kinetic models are also widely used in problems of this kind (e.g., [5–7, 12–15]). They make it possible to determine one or more parameters such as internal energy, molar mass, adiabatic index, and heat of reaction without calculating the detailed chemical composition of the mixture. This simplifies kinetic calculations and significantly reduces their amount, allowing multidimensional numerical calculations of complex detonation flows to be brought to specific results.

The objectives of the work are (i) to develop a generalized model of chemical kinetics for detonation waves in dual-fuel methane–hydrogen mixtures and (ii) to perform a numerical simulation of the cellular structure of the detonation wave in the mixture under consideration in order to verify the proposed kinetic model, study the features of multi-front detonation structures and the evolution of the irregular cellular structure with a change in the fuel ratio.

A simple and physically based generalized model of detonation chemical kinetics is proposed for the stoichiometric methane–hydrogen–air dual-fuel mixture



where α is the mole fraction of hydrogen calculated from the sum of fuel components; $0 \leq \alpha \leq 1$. The basis of this model is the generalized kinetic model for a single-fuel mixture of methane with an oxidizer [6, 7], which has proven its high accuracy in two-dimensional numerical calculations of the DW parameters and cellular structure. The proposed kinetic model has the same set of advantages as in [6, 7]. At $\alpha = 0$ and $\alpha = 1$, the mixture (3.1) corresponds to methane–air and hydrogen–air single-fuel mixtures.

The next phase of the study involves two-dimensional numerical calculations of a multifront DW in mixture (3.1) at several ratios of the fuels. Chemical transformations are described using the proposed kinetic model. Without its use, numerical calculations of the DW would be difficult. At present, a large amount of experimental work has been carried out to measure the DW parameters and structure in the dual-fuel mixture under consideration at various pressures, temperatures, and ratios of the fuels [16–30]. Good agreement between the calculations of a_0 and the qualitative structure of the DW and available experimental data indicates the possibility of using the proposed kinetic model in numerical simulations of complex detonation flows, including calculations of DW propagation in channels of complex geometry and the parameters of a continuous detonation engine.

The cellular structure in a stoichiometric methane–air mixture is highly irregular [6, 17-20]. The size of detonation cells on the surface of soot imprints varies randomly in space. The DW structure includes primary transverse waves (TWs) that are asymmetric to each other and have unequal amplitudes, a set of secondary (tertiary, etc.) waves of decreasing amplitude, and islands of unburned gas in the reaction zone behind the leading edge of the DW. The degree of irregularity of the cellular structure increases with decreasing α [17-19]. Note that this is a qualitative expert assessment based on a comparison of soot imprints. A quantitative criterion for the degree of irregularity has not been developed. The DW cellular structure in a stoichiometric hydrogen–air mixture is close to regular [17-19, 21]. Thus, a change in α in mixture (3.1) from 0 to 1 leads to a change in the detonation structure. The study of this evolution is of independent scientific interest. The corresponding information was obtained in this work by analyzing the results of numerical calculations of detonation structures.

Experiments [31, 32] for a number of single-fuel mixtures revealed a “fine” structure of the leading edge of the DW, i.e., a set of smaller disturbances than the primary TWs (which form the cellular structure). For some mixtures, these shocks are DWs, and for others, they are shock waves (SWs). An empirical criterion for the existence of a “fine” structure of the leading edge of the DW has also been proposed [32]. It is interesting to examine the structure of the leading edge of the DW in the dual-fuel mixture considered here for the presence of a “fine” structure and to check the validity of this criterion [32]. This was done in the present work based on the results of numerical calculations of the DW structure.

Experimental studies [33, 34] have shown the existence of “fine” structures in transverse waves of spinning detonation in hydrogen–oxygen and methane–oxygen mixtures, respectively. The term “fine” structure refers to the presence of multifront (cellular) structures at the leading edge of primary TWs. The “fine” structure of a TW has also been obtained in numerical calculations of the DW cellular structure in mixtures of a single fuel and an oxidizer (e.g., in a methane–air mixture in [6, 7]). Calculations of the two-dimensional structure of DWs in dual-fuel gas mixtures and, in particular, studies of the presence of a “fine” structure in the TW at the DW front in such mixtures have not been reported in the literature before. The calculations presented in this paper show for the first time the existence of a “fine” structure for the methane–hydrogen mixture considered here.

3.2. Generalized detonation kinetics model for a methane-hydrogen dual-fuel mixture

A generalized two-stage chemical kinetics model for detonation combustion of methane was proposed in [6, 7]. It is an extension of the model [35] to H₂-O₂ mixtures.

We now formulate a generalized detonation kinetics model for the methane–hydrogen dual-fuel mixture (3.1). We use the model of [6, 7] as a basis and extend it to the case of the dual-fuel mixture by means of a small addition. At $\alpha = 0$, the proposed model coincides with the model of [6, 7], and at $\alpha = 1$, it coincides with the model of [35]. Below only a brief summary of the developed kinetic model is provided since it is slightly different from the model of [6, 7], and the formulas necessary for calculations are presented.

The chemical reaction is divided into two stages: the induction period and the main heat release. The gas is assumed to be thermally perfect.

The induction period τ_i is calculated according to the criterion [3, 36], which is widely used in numerical simulations of the DW cellular structure. It allows taking into account the spatial and temporal variability of the flow parameters behind the DW front. In the induction zone, the induction parameter Y is calculated as

$$Y(t) = \int_0^t \frac{dt}{\tau}, \quad (3.2)$$

where t is time, $\tau = \tau(\rho, T)$ is the induction period at constant parameters (density ρ and temperature T), $Y(t=0) = 0$. The time of the end of the induction period $t = \tau_i$ is given by the relation $Y(t = \tau_i) = 1$. In the present numerical simulation, a differential version of this criterion is used. The two-

dimensional Euler equations for a compressible gas is supplemented with an additional differential equation for the induction parameter Y :

$$\frac{\partial \rho Y}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Y}{\partial x} + \frac{\partial \rho v Y}{\partial y} = \frac{\rho}{\tau},$$

where u and v are the velocity components in the x and y directions, respectively. At $Y \geq 1$, the induction period is considered to be completed in a given computational cell.

Real multistep processes during the induction period are replaced by an overall reaction satisfying the following conditions. (i) The total heat release by the end of the induction period is much less than the maximum possible heat effect corresponding to the complete recombination of the reaction products. (ii) During the induction period, methane completely decomposes to form CO and OH. (iii) Hydrogen initially present in mixture (3.1) is not involved in the overall reaction. Assumption (iii) complements the model of [6, 7], which considers methane mixtures without hydrogen. The kinetic model proposed here for (3.1) becomes the model of [6, 7] if the initial mixture does not contain hydrogen ($\alpha = 0$). The remaining assumptions and formulas and the algorithm for calculating the constants in the proposed model are the same as in the model of [6, 7].

In view of conditions (i)–(iii), it is assumed that in the induction zone, all methane molecules are involved sooner or later in the reaction $\text{CH}_4 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{OH} + 1,5\text{H}_2$. We now introduce the fraction of methane molecules β in the induction zone that have not decomposed at a certain time: $\beta = 1$ at $Y = 0$ and $\beta = 0$ at $Y = 1$. Then the chemical composition of the mixture has the form

$$(1-a)\beta\text{CH}_4 + [(1-\alpha)\beta+1-0,5\alpha]\text{O}_2 + (1-\alpha)(1-\beta)(\text{CO} + \text{OH}) + \quad (3.3)$$

$$+ [1,5(1-\alpha)(1-\beta)+\alpha]\text{H}_2 + (2-1,5\alpha)3,76\text{N}_2$$

In view of the intensification of chemical transformations at the end of the induction period, the following calculation formula is proposed: $\beta = 1 - Y$. The overall reaction and the formulas for calculating Y and β allow one to determine the detailed chemical composition of the mixture in the induction zone at any time within the framework of explicit algebraic formulas and hence to calculate the molar mass of the mixture and the chemical part of its internal energy using the tabulated values of the energies of formation for individual components [37].

The chemical part of the internal energy of the mixture U_{chem} in the induction zone can be calculated using the corresponding tabulated values for individual components and their mole fractions calculated according to (3):

$$U_{chem} = \sum_i \delta_i U_{chem}^i,$$

where δ_i and U_{chem}^i are the mole fraction and chemical part of the internal energy of the i -th component. The chemical part of the internal energy of H, O, N₂, and CO is assumed to be zero, the chemical parts of the internal energies of H₂, O₂, OH, and H₂O molecules are equal to the corresponding molar energies of dissociation D_i with the opposite sign, and $U_{chem}^{CH_4} = D_{CO} - D_{CH_4}$. Therefore, in accordance with (3.3), we obtain

$$U_{chem} = [\delta_{CH_4}(D_{CO} - D_{CH_4}) - \delta_{H_2}D_{H_2} - \delta_{O_2}D_{O_2} - \delta_{OH}D_{OH} - \delta_{H_2O}D_{H_2O}] \mu, \quad (3.4)$$

where $D_{H_2} = 432346$ J/mol, $D_{OH} = 424374$ J/mol, $D_{O_2} = 493929$ J/mol, $D_{H_2O} = 918421$ J/mol, $D_{CO} = 1070942$ J/mol, and $D_{CH_4} = 1641720$ J/mol [37].

It is assumed that the chemical composition of the methane–air mixture in the main heat release zone (and in the state of chemical equilibrium) consists of the following components: H, O, OH, H₂, O₂, H₂O, CO, CO₂, and N₂. However, the detailed chemical composition of the mixture is not calculated within the framework of the model. The molar mass of the gas μ is calculated using the kinetic equation

$$\frac{d\mu}{dt} = 4K_+ \frac{\rho^2}{\mu} \left(1 - \frac{\mu}{\mu_{\max}}\right)^2 - AT^{3/4} (1 - e^{-\theta/T})^{3/2} \rho \left(\frac{\mu}{\mu_{\min}} - 1\right) e^{-E/RT}, \quad (3.5)$$

with the initial condition $\mu = \mu_*$, where μ_* is the molar mass of the mixture at the end of the induction period. Hereinafter A and K_+ are the generalized rate constants of dissociation and recombination, θ is the effective excitation temperature of the vibrational degrees of freedom of molecules, R is the universal gas constant, μ_{\min} and μ_{\max} are the molar masses of the mixture in the completely dissociated and completely recombined states. The chemical part of the internal energy of the mixture is calculated using the algebraic formula

$$U_{chem}(\mu) = E \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{\min}} \right) + \Delta(\mu), \quad (3.6)$$

where E is the average dissociation energy of the reaction products. The correction $\Delta(\mu)$ to the first term ensures the continuity of the calculation of U_{chem} at the boundary between the induction zone and the main heat release

zone. But it leads to inaccuracy in the calculation of U_{chem} in the main heat release zone. The quantity $\Delta(\mu)$ is calculated using the formula

$$\Delta(\mu) = [U_{chem}^* - E(\frac{1}{\mu_*} - \frac{1}{\mu_{min}})] \cdot \psi(\mu), \quad (3.7)$$

Where

$$\psi(\mu) = \frac{\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{CJ}}}{\frac{1}{\mu_*} - \frac{1}{\mu_{CJ}}} \text{ when } \mu_* \leq \mu \leq \mu_{CJ},$$

$$\psi(\mu) = \frac{\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{min}}}{\frac{1}{\mu_*} - \frac{1}{\mu_{min}}} \text{ when } \mu_{min} \leq \mu < \mu_*,$$

and

$$\psi(\mu) = 0 \text{ when } \mu > \mu_{CJ}.$$

Here $\psi(\mu)$ is the correction factor and U_{chem}^* is the chemical part of the internal energy of the mixture at the end of the induction zone (μ_* and U_{chem}^* correspond to the chemical composition (3) at $\beta = 0$), and μ_{CJ} is the molar mass of the mixture at the Chapman-Jouguet (CJ) point. The factor $\psi(\mu)$ is introduced to gradually reduce the correction $\Delta(\mu)$ to zero as μ approaches μ_{CJ} . This factor also allows $\Delta(\mu)$ to be reduced to zero in the case of complete dissociation of the mixture ($\mu = \mu_{min}$) with a strong local increase in temperature at hot spots.

The maximum relative uncertainty in calculating the chemical part of the internal energy U_{chem} due to Δ is:

$$\frac{\Delta}{E\left(\frac{1}{\mu_*} - \frac{1}{\mu_{\min}}\right)}.$$

It depends on the initial chemical composition of the dual-fuel mixture, but is very small (ranges from 0,05 (for $\alpha = 1$) to 0,02 (for $\alpha = 0$)). Moreover, this uncertainty decreases up to zero as $\mu \rightarrow \mu_{CJ}$ and $\mu \rightarrow \mu_{\min}$.

The thermodynamic part of the internal energy of the mixture U_{therm} in both the induction zone and the main heat release zone is calculated using the formula

$$U_{therm}(T, \mu) = \left[\frac{3}{4} \left(\frac{\mu}{\mu_a} + 1 \right) + \frac{3}{2} \left(\frac{\mu}{\mu_a} - 1 \right) \frac{\theta / T}{\exp(\theta / T) - 1} \right] \frac{RT}{\mu}, \quad (3.8)$$

where μ_a is the molar mass of the mixture in the atomic state. The total internal energy of the gas U is the sum of its thermodynamic and chemical parts:

$$U(T, \mu) = U_{therm}(T, \mu) + U_{chem}(\mu). \quad (3.9)$$

The algorithm for calculating the constants E , A , K_+ , θ , μ_a , μ_{\min} , and μ_{\max} is presented in [6, 35].

Thus, the proposed model similar to the model of [6, 7] allows one to calculate the molar mass and internal energy of the gas in the Euler equations using a set of algebraic formulas and just one ordinary differential kinetic equation (5).

Like the model of [6, 7], the proposed model is also suitable for calculating chemical equilibrium. For this, the right-hand side in (5) and the correction $\Delta(\mu)$ in (6) should be set equal to zero. As a result, from (5) we obtain an algebraic equation of chemical equilibrium which is quadratic with respect to $\mu(\rho, T)$, and formulas (6) and (8–9) can be used to calculate the internal energy and its thermodynamic and chemical parts as explicit algebraic functions of T and μ .

Note that in the proposed kinetic model, U_{therm} in both the induction zone and the main heat release zone is calculated using the approximate formula (8). At the same time, based on the detailed chemical composition of mixture (3), the value of U_{therm} in the induction zone can be calculated using the corresponding tabulated values (e.g., from the reference book [37]) for each of the components in (3). The calculation of U_{therm} in the induction zone using (8) is more convenient, since formula (8) is also used in the main heat release zone, and therefore the calculated quantity U_{therm} is continuous when passing from the induction zone to the main heat release zone. Note that as in the model [6, 7], the accuracy of formula (8) for the dual-fuel mixture under consideration is no worse than $RT / 2\mu$.

To use (2), we calculate the induction period τ in the considered dual-fuel mixture using the formula proposed in [38]:

$$\tau = \tau_{H_2}^{\alpha} \tau_{CH_4}^{1-\alpha},$$

where τ_{H_2} and τ_{CH_4} are the induction periods in hydrogen–air and methane–air single-fuel mixtures. The quantities τ_{H_2} and τ_{CH_4} are calculated using the formulas from [39, 41] and [42], respectively:

$$\tau_{H_2} = \frac{A_{H_2}}{[O_2]} e^{E_{H_2}/RT},$$

$$\tau_{CH_4} = \frac{A_{CH_4}}{[O_2]} e^{E_{CH_4}/RT},$$

where $[O_2]$ is the oxygen concentration (in mol/m³) ahead of the wave front, $A_{H_2} = 24.83 \cdot 10^{-8}$ mol·s/m³, $E_{H_2} = 71816$ J/mol, $A_{CH_4} = 6.0 \cdot 10^{-9}$ mol·s/m³, and $E_{CH_4} = 139001$ J/mol.

The model constants E , A , θ , μ_a , μ_{\min} , and μ_{\max} were calculated for each value of α according to the algorithm presented in [6, 35]. For example, for $\alpha = 0,6$, we have $\mu_a = 16.63 \cdot 10^{-3}$ kg/mol, $\mu_{\min} = 17.36 \cdot 10^{-3}$ kg/mol, $\mu_{\max} = 26.72 \cdot 10^{-3}$ kg/mol, $A = 5.1 \cdot 10^8$ m³K^{-3/4}/mol·s, and $E = 4.6731 \cdot 10^5$ J/mol, $\theta = 3000$ K. The constant K_+ does not depend on the initial composition of the mixture: $K_+ = 0,6 \cdot 10^3$ m⁶/mol²·s [6, 35].

Note that the proposed kinetic model covers the entire range of ratios of the fuels: $0 \leq \alpha \leq 1$. It has the same set of advantages as the models from [6, 7, 35]. That is, it is simple, physically based and provides a fairly accurate description of chemical transformations in numerical calculations of multifront DW.

It should be emphasized that the proposed model should be verified by numerical calculations of the DW structure (including calculations of the detonation cell size) rather than by comparison with detailed kinetic calculations, since their adequacy to real chemical transformations behind the DW front has not been verified.

To demonstrate the performance of the proposed kinetic model in calculating chemical equilibrium, we calculated the CJ wave parameters in mix-

ture (1) for α values of 0, 0,6, 0,8, and 1. The gas at the CJ point was assumed to be in chemical equilibrium. The same system of equations was used as in [35]. A comparison was made with a calculation of the DW parameters in which a detailed system of chemical equilibrium equations was used and the detailed chemical composition of the mixture was determined [43]. The difference in the results for detonation velocity, temperature, and molar mass in the CJ plane between the two types of calculations does not exceed 2%.

3.3. Governing equations and numerical algorithm

The system of equations, initial and boundary conditions, mathematical methods, and algorithm used for calculating the DW parameters and structure are similar to those described in [5–7, 40, 41].

Direct initiation of the DW was provided by instantaneous energy release (due to sudden changes in pressure and temperature) in a square region near the left closed wall of the flat channel. The size and energy of the initiation source were obviously sufficient to initiate a continuous DW; i.e., a supercritical initiation process was implemented. The minimum required size of the energy release region and the minimum initiation energy were not determined. The rectangular initiation region was located at the center of the channel. The characteristic dimensions of the center are $\Delta x * \Delta y = 0,4H * 0,4H$, where H is the channel width. At the initial time, the volume density of the internal energy of the mixture at the initiation region increased by approximately $\Delta E \approx 1,58 \cdot 10^7 \text{ J/m}^3$, resulting in an increase in pressure in the non-reacting gas to $65 \div 70 \text{ atm}$ and an increase in temperature to $3300 \div 3500 \text{ K}$. The dimensions of the initiation region $\Delta x * \Delta y$ and the value of ΔE for each mixture composition were slightly varied to ensure a certainly supercritical regime of DW initiation in the channel. The numerical calculation of DW

propagation was performed until the detonation reached a self-sustained regime. In this stationary (on average over time) regime, the DW should travel a distance of at least ten calibers. The multifront (cellular) structure of the DW was determined in this final section. Before this, the wave front managed to travel a distance of several tens (fifty to one hundred) calibers from the initiation point.

According to the generally accepted calculation procedure, the value of a_0 was taken to be equal to the channel width H at which—after the wave reaches a stationary regime—the detonation structure includes two maximally symmetric primary TWs moving in opposite directions along the transverse coordinate.

In the numerical solution of the system of equations, we used an adaptive moving structured multi-zone grid with local refinement along the longitudinal coordinate in the vicinity of the leading edge of the DW. The grid construction is described in more detail in [7–9]. The total number of cells of the computational grid along the x and y axes was N_x and N_y , respectively. The value $x=0$ corresponded to the left boundary of the computational domain. The moving grid along the x axis consisted of uniform and non-uniform parts. The uniform grid contained N_{x1} cells of size h_x and covered the flow region with large gradients of parameters in the vicinity of the leading shock front of the DW and moved together with it. The remaining $N_{x2} = N_x - N_{x1}$ cells formed a non-uniform grid that filled the computational domain from $x=0$ to the beginning of the uniform grid. A fixed uniform grid with a computational cell size $h_y = H/N_y$ (H is the transverse size of the channel; typically, $h_y = h_x$) was used on the y axis. The main calculations were made for $N_x = 2000$, $N_{x1} = 1750$, and $N_y = 2000$.

As a rule, to determine a_0 , it was sufficient to perform 3–4 iterations over the channel width for mixtures with a regular cellular structure and up to 6–8 iterations for an irregular DW structure.

A channel width variation of 10 percent or more relative to the calculated cell size led to a marked violation of the symmetry between the primary transverse waves, the disappearance of one of them or the formation of two transverse waves moving in the same direction. Accordingly, the error in calculating a_0 during the numerical simulation did not exceed 10%, unless otherwise specified.

Numerical calculations of the DW parameters and structure in mixture (1) were carried out for α values of 0, 0,6, 0,8, and 1,0. Additionally, similar calculations have been performed for stoichiometric methane-oxygen mixture.

3.4. Two-dimensional numerical simulation and discussion

The results of the calculation of detonation structures are presented in Figs. 3.1–3.9, where x_{fr} is the distance from the leading shock front to the left (closed) boundary of the channel $x=0$, r/r_0 is the normalized density, p/p_0 is the normalized pressure, the temperature T is in degrees Kelvin, and the subscript 0 denotes the initial parameters of the mixture. The calculations were carried out for the standard initial conditions $p_0=1$ atm and $T_0=293,15$ K. The detonation front propagates from left to right along the channel. The TWs at the DW front are convex in the direction of their propagation across the channel.

Figures 3.1–3.3 correspond to mixture (1) at $\alpha = 0,6$. Figure 3.1 shows the calculation at $a_0 = H = 7$ cm. The calculated value of a_0 is in good

agreement with experiment (6.0–6.5 cm [16, 17, 19]). The DW structure includes two primary TWs of practically equal intensity, denoted as AA and BB. They move in antiphase along the transverse coordinate. Their position relative to the channel axis is also quite symmetric. There are also secondary TWs, some of which are denoted as aa, bb, and cc. Smaller disturbances (tertiary TWs) are also present at the DW front. Small islands of unburned gas are formed in the reaction zone. The irregularity of the multifront DW structure is manifested in the absence of strict symmetry of the flow and the presence of a system of secondary/tertiary TWs and small regions of unburned gas. Calculations show that in the channel considered here, the DW regime with two primary TWs is stable. A more than twofold increase in the distance traveled by the DW from $x_{fr} = 348$ cm to $x_{fr} = 800$ cm does not lead to a significant change in the multifront structure of the DW. Fine details of the flow, such as secondary and even smaller TWs, the number and shape of unburned gas islands, etc., of course, vary as the DW propagates. A comparison of Figs. 3.1–3.3 shows that decreasing or increasing the channel height relative to the cell size by 0,5 cm leads to a loss of symmetry during the collision of the primary TWs and to an increase in the size and number of secondary TWs. Thus, the transverse size of the detonation cell for the mixture under consideration was calculated with an error not exceeding 8%.

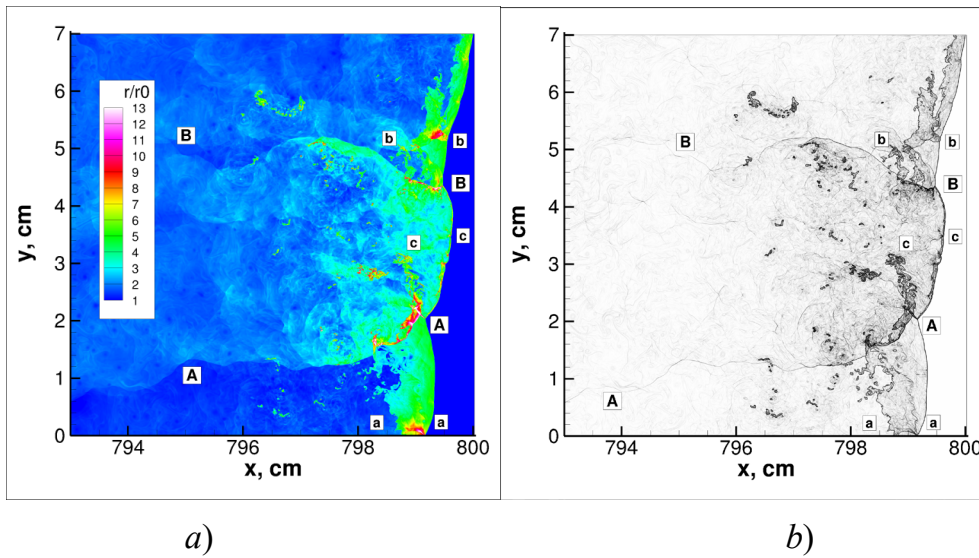


Fig. 3.1. Detonation wave structure in a $0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1.1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$ mixture, $\alpha=0,6$, $a_0=H=7$ cm, $x_{fr}=800$ cm:
 a) normalized density flowfield; b) numerical Schlieren visualization of flowfield.

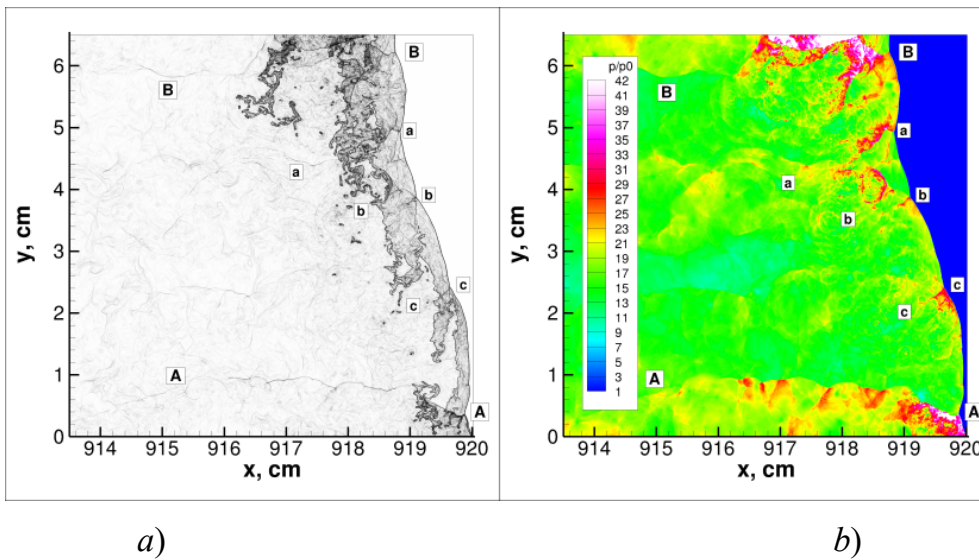


Fig. 3.2. Detonation wave structure in a $0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1.1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$ mixture, $\alpha=0,6$, $H=6.5$ cm, $x_{fr}=920$ cm:
 a) numerical Schlieren visualization of flowfield; b) normalized pressure flowfield.

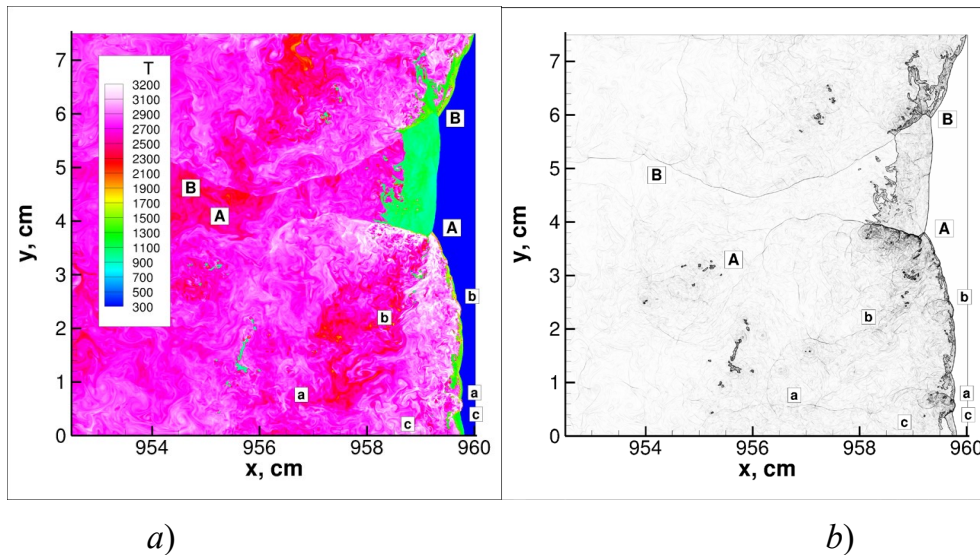


Fig. 3.3. Detonation wave structure in a $0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1,1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$ mixture, $\alpha=0,6$, $H=7.5$ cm, $x_{fr}=960$ cm:

a) temperature flowfield, K; b) numerical Schlieren visualization of flowfield.

Fig. 3.4 shows a front-propagation velocity (solid line) as a function of DW front position in a channel $H=7$ cm, parameters of calculations correspond to Fig. 3.1. The DW reaches a quasi-stationary regime approximately after the traveled path $x_{front} = 3\div 3,5$ m. The average DW velocity obtained on the base from $x_{front}=500$ cm to $x_{front}=812$ cm is $D_{aver}=1838$ m/s (dashed line). This value is slightly higher than the CJ velocity (dash-dot line) $D_{CJ}=1812$ m/s derived from thermodynamic calculations.

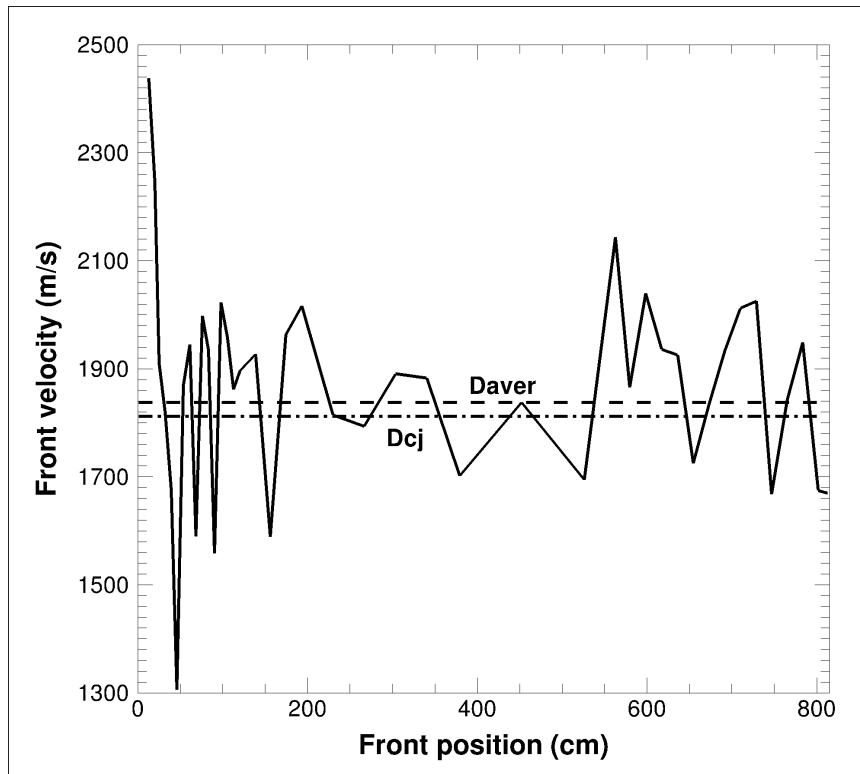


Fig. 3.4. Front-propagation velocity (solid line) as a function of front position in channel.

Mixture: $0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1,1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0,6$, $a_0=H=7$ cm (see Fig. 1).

Average velocity $D_{aver} = 1838$ m/s (dashed line), and ideal CJ velocity $D_{CJ} = 1812$ m/s (dash-dot line).

Figures 3.5–3.7 shows the results of calculating the DW structure in mixture (1) at $\alpha = 0,8$. The width of the channel in Fig. 1,5 is equal to the transverse size of the cell: $a_0 = H = 3,3$ cm. The calculated cell size is in good agreement with the experimental value (2,8–3,3 cm) [16, 17, 19]). As in Fig. 3.1, there are two primary TWs AA and BB approximately equal in intensity and length, but in this case, they are significantly asymmetric. In addition to them, there are a large number of secondary TWs. Numerical experiments show that in the mixture under consideration, complete symmetry of the primary TWs cannot be achieved by varying H . This indicates that the cellular structure of the DW is significantly irregular. It can be seen from Figs. 3.6 and 3.7 that even

a slight increase or decrease of only 1,5% in the channel width relative to a_0 leads to significant deformation of the multifront structure of the DW. That is, there is a kind of resonance in the response of the detonation structure to variations in the parameter H . For example, a decrease in H to 3,25 cm (Fig. 3.6) leads to a significant attenuation of the primary TW BB and a significant amplification of the wave AA. Furthermore, the DW has its own system of transverse waves at the front, the so-called “fine” structure of the leading edge of the wave. With an increase in the width to $H = 3,35$ cm (Fig. 3.7), there is a significant amplification of one of the secondary TWs denoted as aa. It becomes almost equal in intensity and length to the primary TWs AA and BB, which are practically identical in shape and intensity.

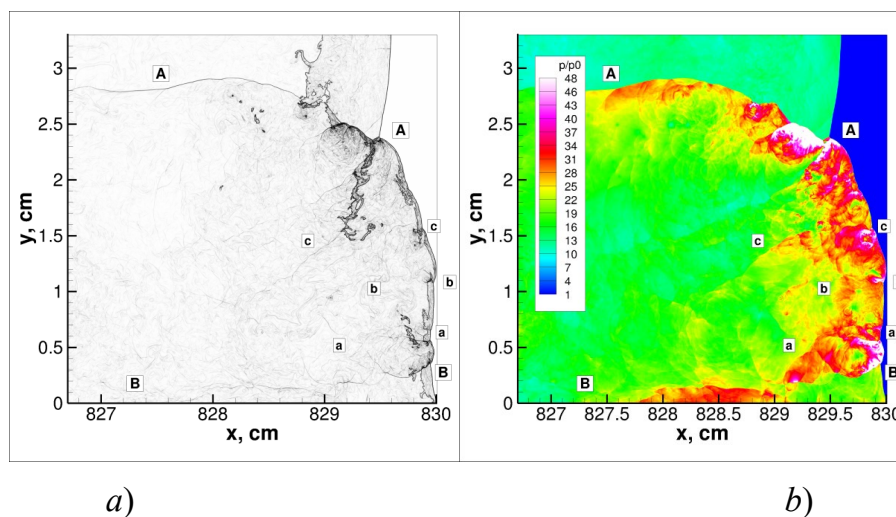


Fig. 3.5. Detonation wave structure in a $0,8\text{H}_2 + 0,2\text{CH}_4 + 0,8(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$ mixture, $\alpha=0,8$, $a_0=H=3,3$ cm, $x_{fr}=830$ cm:
a) numerical Schlieren visualization of flowfield; b) normalized pressure flowfield.

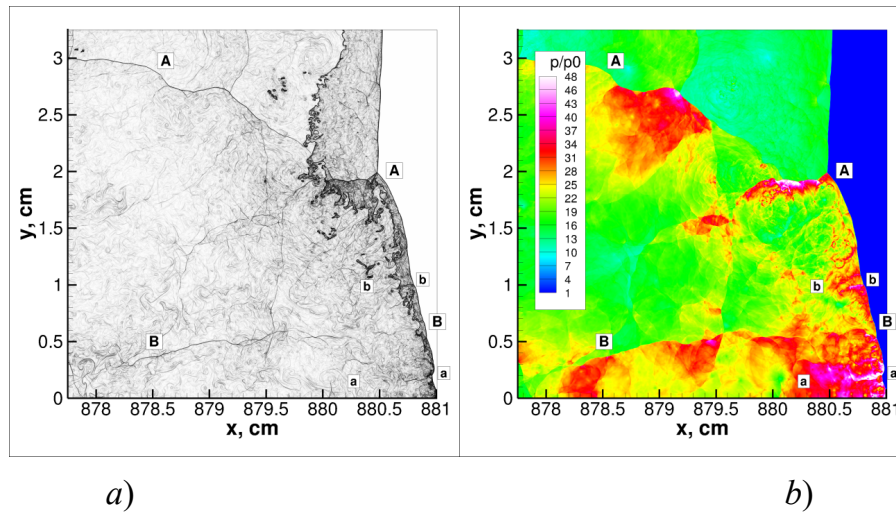


Fig. 3.6. Detonation wave structure in a $0,8\text{H}_2 + 0,2\text{CH}_4 + 0,8(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$ mixture, $\alpha=0,8$, $H=3,25$ cm, $x_{fr}=881$ cm:
a) numerical Schlieren visualization of flowfield; b) normalized pressure flowfield.

From a comparison of Figs. 3.1 and 3.5, it is difficult to draw an unambiguous conclusion about the difference in the degree of regularity of the cellular structure of the DW when the value of α changes from 0,6 to 0,8. Since in a stoichiometric hydrogen–air mixture ($\alpha=1,0$), the cellular DW structure is nearly regular [17–19, 21], it should be expected that as α increases from 0,8 to 1,0, the detonation structure will sooner or later become almost completely regular. The results of calculating the detonation structures for α equal to 0,6 and 0,8 sharply contrast with the results of two-dimensional numerical simulation of the DW structure in a stoichiometric dual-fuel mixture of carbon monoxide with hydrogen (CO/H₂ syngas) [40, 41], according to which a monotonic increase in the proportion of hydrogen leads to a monotonic regularization of the multifront structure.

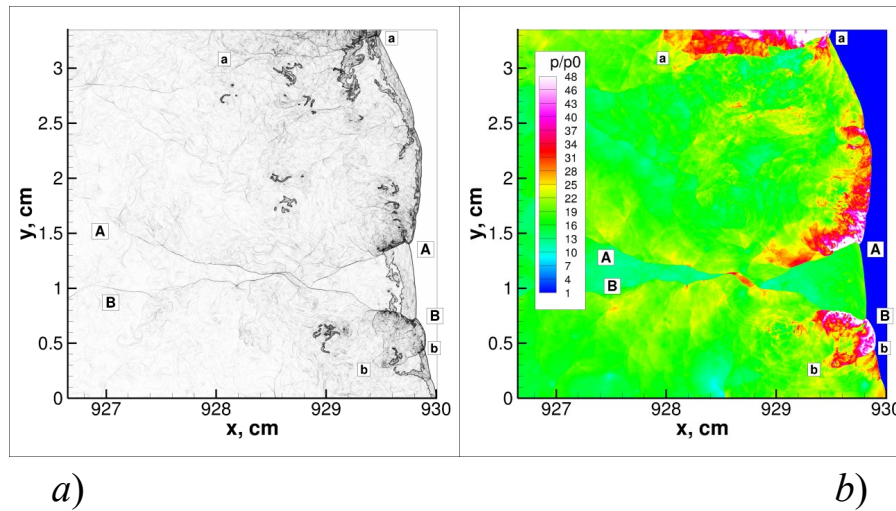


Fig. 3.7. Detonation wave structure in a $0,8\text{H}_2 + 0,2\text{CH}_4 + 0,8(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$ mixture, $\alpha=0,8$, $H=3,35$ cm, $x_{fr}=930$ cm:
 a) numerical Schlieren visualization of flowfield; b) normalized pressure flowfield.

Figure 3.8 shows the calculation results for $\alpha = 0$ (stoichiometric single-fuel methane–air mixture). The detonation cell size $a_0 = H = 33$ cm and the qualitative structure of the DW are in good agreement with experiment [20]. Similar calculation results have been obtained previously [6, 7]. It is evident that the DW structure is highly irregular. This is manifested in the strong spatial asymmetry of the primary TWs AA and BB, the presence of a large number of asymmetric and randomly moving secondary (tertiary, etc.) TWs, and the formation of unburned gas regions in the reaction zone.

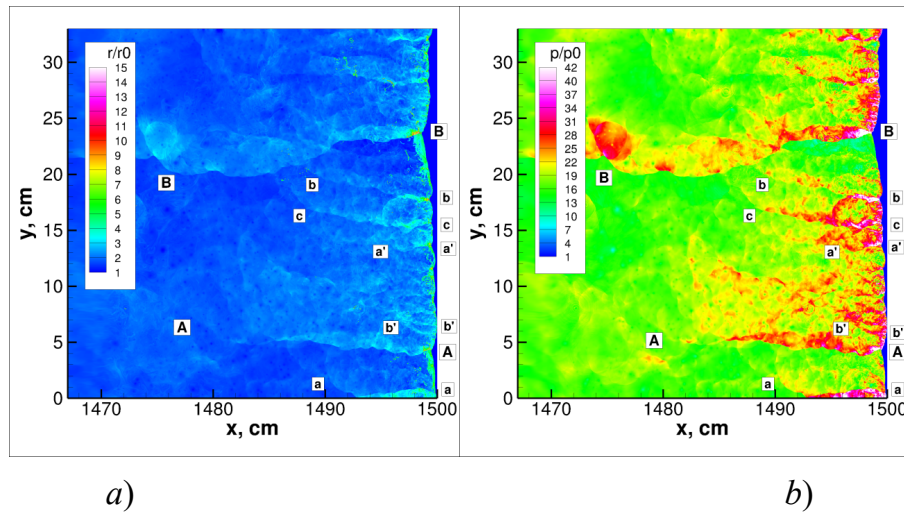


Fig. 3.8. Detonation wave structure in a stoichiometric methane-air mixture $\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0$, $a_0 = H = 33$ cm, $x_{fr}=1500$ cm:
a) normalized density flowfield; b) normalized pressure flowfield.

Calculation results for a stoichiometric single-fuel hydrogen–air mixture ($\alpha = 1$) are shown in Fig. 3.9. The cell size $a_0 = H = 1,4$ cm agrees well with the experimental value (0,8–1,0 cm [16–19] and 1,4 cm [21, 44]). The qualitative structure of the DW is also in agreement with experiment. It is nearly regular: there are two primary TWs moving in antiphase along the transverse coordinate, which are approximately symmetric in space and approximately equal in amplitude, and there are no secondary TWs or unburned gas islands.

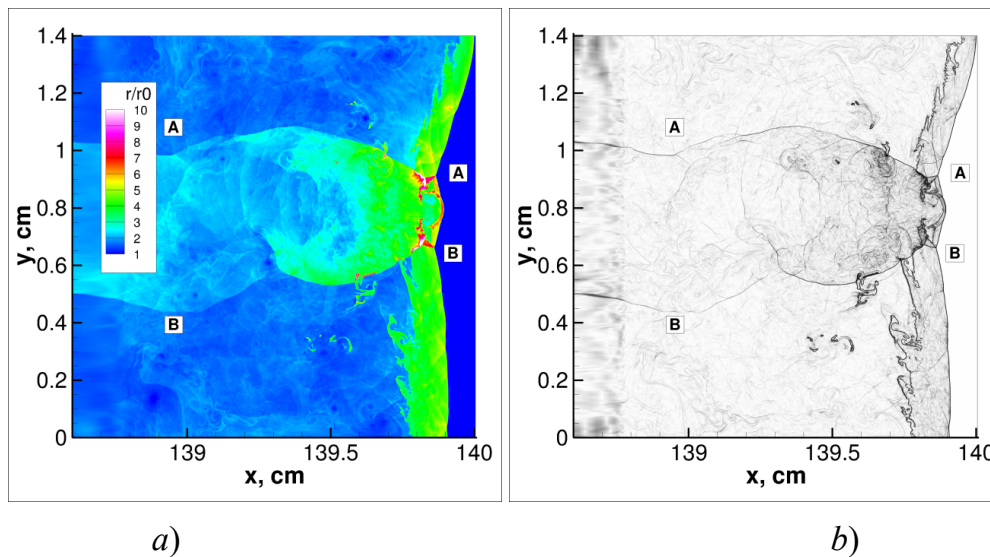


Fig. 3.9. Detonation wave structure in a stoichiometric hydrogen-air mixture

$H_2 + 0,5(O_2 + 3,76N_2)$, $\alpha=1$, $a_0 = H= 1,4$ cm, $x_{fi}=140$ cm:

a) normalized density flowfield; b) numerical Schlieren visualization of flowfield.

Figure 3.10 summarizes the calculated and experimental (without indicating the experimental error) sizes of the detonation cell for all the mixtures considered above. It is evident that that they are in good agreement with each other. Our calculations showed that $a_0/b=0,6\div 0,66$ for all the mixtures studied, where b is the length of the detonation cell.

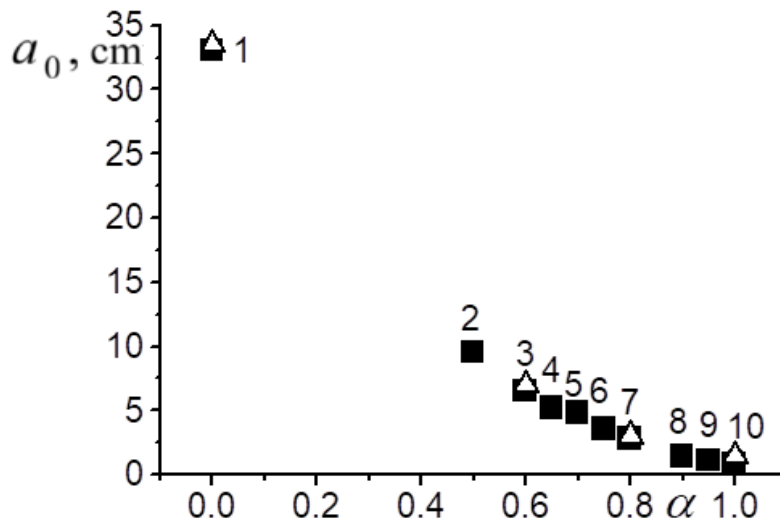


Fig. 3.10. The calculated (triangles) and experimental (squares) sizes of the detonation cell in a mixture $\alpha\text{H}_2 + (1-\alpha)\text{CH}_4 + (2-1,5\alpha)(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$. The experimental data: 1 – [20]; 2 – [16, 17]; 3, 6, 7, 10 – [17], 4 – [19], 5 – [17, 19], 8 – [17–19], 9 – [18].

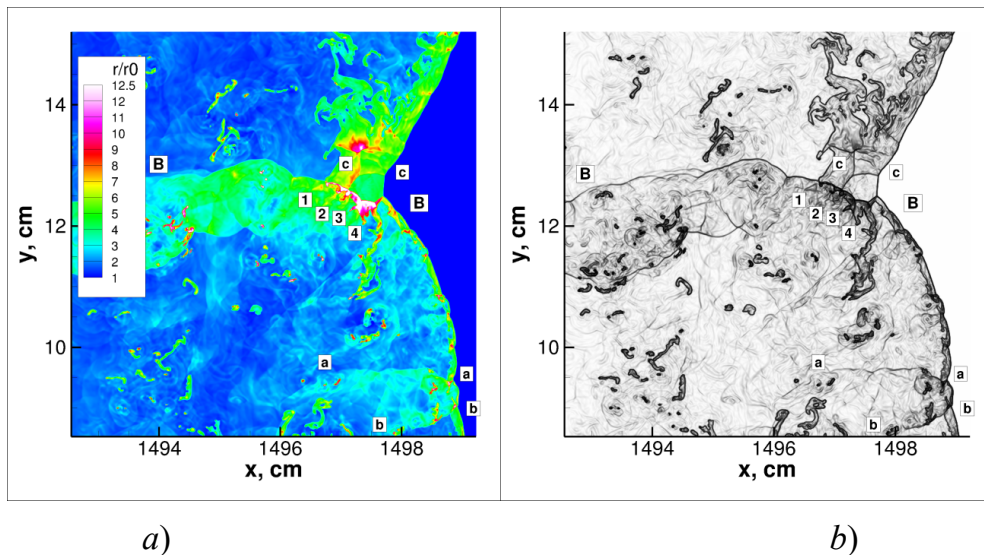
3.5. «Fine» structure of the leading edge of the detonation wave

We now analyze the calculated structure of the leading edge of the DW.

According to the empirical criterion proposed in [32], the leading edge has a “fine” structure if the parameter $Z > 6.5$ ($Z = E_{ind}/RT_{10}$, where E_{ind} is the effective activation energy in the induction zone and T_{10} is the temperature in the induction zone of the one-dimensional CJ DW). For $Z < 6.2$, this structure does not exist.

According to our model of detonation kinetics and the calculation of the CJ DW parameters [43], for a mixture of $0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1,1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$ with $\alpha = 0,6$, we have $Z = 8.4$. In this case, Figs. 3.1–3.3 clearly show the “fine” structure of the leading edge of the DW. For a mixture of $0,8\text{H}_2 + 0,2\text{CH}_4 + 0,8(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$ with $\alpha = 0,8$, we have $Z = 7.3$. The presence of secondary TWs in this mixture, i.e., the existence of a “fine” structure of the DW front, is shown in Figs. 3.5–3.7.

For a stoichiometric methane–air mixture of $\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$ the parameter $Z=10,8$, and Figs. 3.8 and 3.11 show the existence of secondary and tertiary TWs at the leading edge of the DW. Figures 3.12 and 3.13 show the DW structure calculated in our articles [45, 46] using the model [6, 7] for a fuel-rich (equivalence ratio $\varphi=1,5$) methane–air mixture of $1,5\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$ in a channel of width $a_0 = H = 50$ cm under normal initial conditions. At the wave front, one can see numerous secondary and tertiary TWs and regions of unburned mixture in the heat release zone, denoted as P1, P2, and P 3. For this mixture, $Z=10,9$.



a) *b)*
 Fig. 3.11. Magnified fragment of detonation wave structure in a stoichiometric methane-air mixture $\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\alpha=0$, $a_0 = H = 33$ cm, $x_{fr}=1500$ cm (see Fig. 3.8):
 a) normalized density flowfield; b) numerical Schlieren visualization of flowfield.

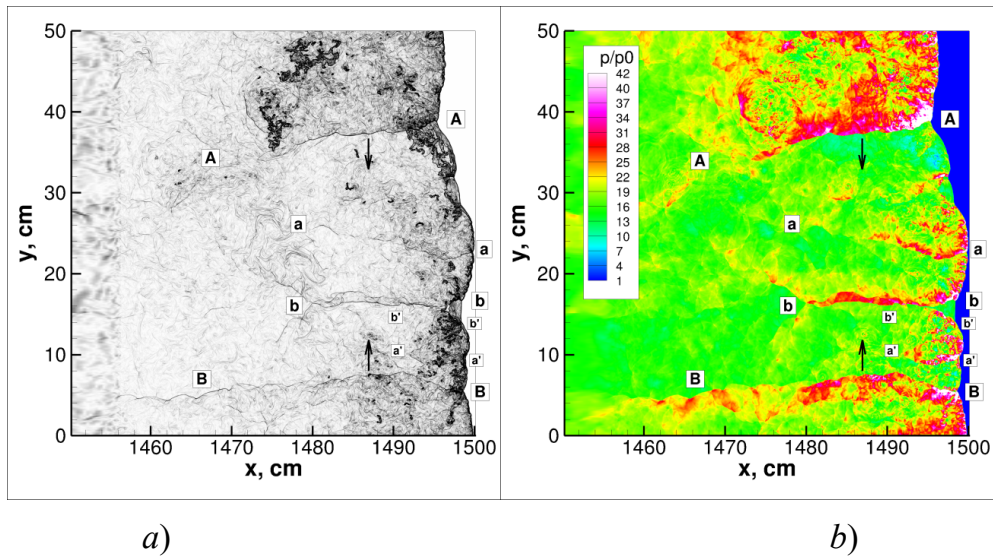


Fig. 3.12. Detonation wave structure in a rich methane-air mixture
 $1,5\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\varphi=1,5$, $a_0 = H = 50$ cm, $x_{fr} = 1500$ cm:
 a) numerical Schlieren visualization of flowfield; b) normalized pressure flowfield.

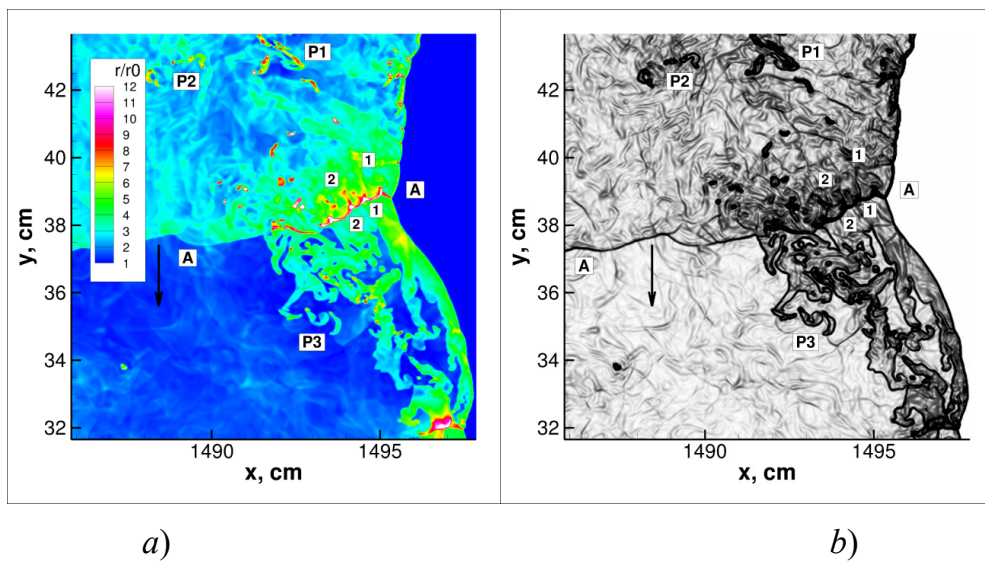


Fig. 3.13. Magnified fragment of primary TW AA structure
 in a rich methane-air mixture
 $1,5\text{CH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, $\varphi=1,5$, $a_0 = H = 50$ cm, $x_{fr}=1500$ cm (see Fig. 3.12):
 a) normalized density flowfield; b) numerical Schlieren visualization of flowfield.

For a stoichiometric methane–oxygen mixture of $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$, the value of the parameter under consideration is $Z=8.35$. Figures 3.14 and 3.15 show secondary and tertiary waves at the front for this mixture.

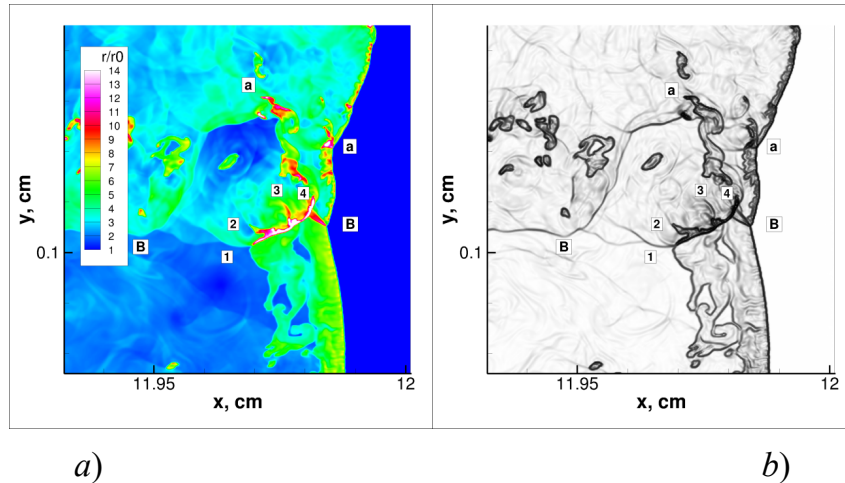


Fig. 3.14. Magnified fragment of primary TW BB structure in a stoichiometric methane-oxygen mixture $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$, $H = 0,35$ cm, $x_{fr}=12$ cm: a) normalized density flowfield; b) numerical Schlieren visualization of flowfield.

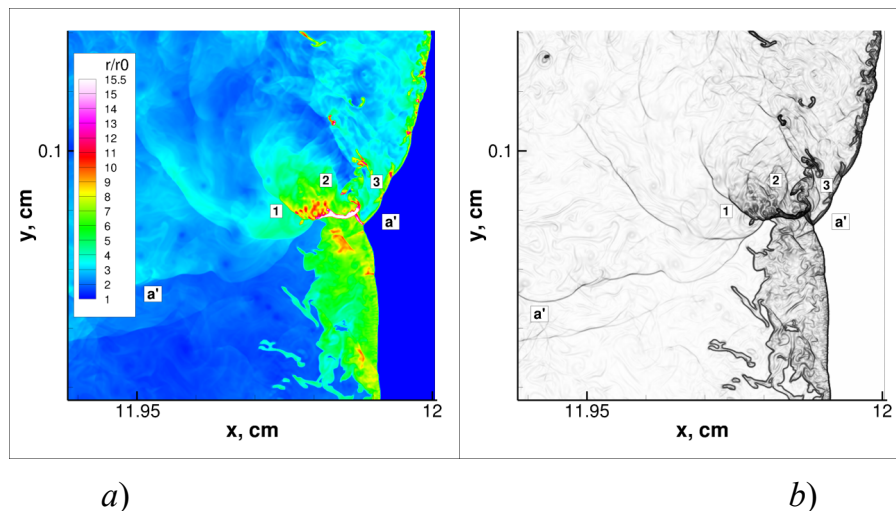


Fig. 3.15. Magnified fragment of a tertiary TW a'a' structure in a stoichiometric methane-oxygen mixture $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$, $H = 0,35$ cm, $x_{fr}=12$ cm, increased spatial resolution calculation: a) normalized density flowfield; b) numerical Schlieren visualization of flowfield.

For a stoichiometric hydrogen-air mixture of $H_2 + 0,5(O_2 + 3,76N_2)$ we have $Z=5.4$. The structure of the DW front in this mixture is presented in Fig. 3.9. It is evident that the leading shock front of the DW is smooth, without secondary and tertiary shock waves. Our 2D numerical studies of the DW structure in a stoichiometric hydrogen–mixture of $H_2 + 0,5O_2$ [5, 40, 41] with $Z=4.8$ have shown a similar result: the absence of a «fine» structure of the leading edge of the DW. Note that the calculated detonation cell sizes for the two hydrogen mixtures considered agree within the experimental error with the entire set of experimental data.

The results of numerical simulations for the «fine» structure of the leading edge of the DW are summarized in Table 1. For methane and methane–hydrogen mixtures, the parameter Z was higher than the critical value $Z=6.5$, and numerical experiments established the existence of a «fine» structure of the leading DW edge in all these mixtures. In hydrogen mixtures, this parameter is less than the experimental criterion $Z=6.2$ and there is no «fine» structure in the DW front. It is obvious that the empirical criterion [32] is satisfied for the examples considered.

Table 1. Parameter Z values for the “fine” structure of the DW leading edge:

Mixture	Z	«Fine» structure	Mixture	Z	«Fine» structure
$0,6H_2 + 0,4CH_4 + 1,1(O_2 + 3,76N_2)$	8.4	Yes	$CH_4 + 2O_2$	8.35	Yes
$0,8H_2 + 0,2CH_4 + 0,8(O_2 + 3,76N_2)$	7.3	Yes	$H_2 + 0,5(O_2 + 3,76N_2)$	5.4	No
$CH_4 + 2(O_2 + 3,76N_2)$	10,8	Yes	$H_2 + 0,5O_2$	4.8	No
$1,5CH_4 + 2(O_2 + 3,76N_2)$	10,9	Yes			

3.6. «Fine» structure of the primary transverse wave

Here we analyze the structure of the primary TWs obtained in these calculations.

The calculation results for a stoichiometric methane–air mixture are presented in Fig. 3.11. The figure shows an enlarged fragment of the flow with the primary transverse wave BB propagating upward. At the front of the transverse wave BB, there are transverse DWs, marked with numbers 1–4. That is, the TW has a “fine” structure in which the DWs propagate behind the leading shock front of the TW. In Fig. 3.13–3.17, similar DWs at the front of the primary TWs are also marked with numbers. Figure 3.13 shows the existence of a «fine» structure of the TW in a rich methane–air mixture [45, 46]. The “fine” structure of the TW was also obtained in a mixture of $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$ (Fig. 3.14). Calculations of detonation in this mixture showed the presence of a multifront structure even for lower-order TWs. For example, Fig. 3.15 shows the cellular structure of the front of a tertiary TW denoted as a’a’.

For $\alpha = 0,6$, numerical modeling also show the presence of a «fine» structure of TWs. Enlarged fragments of the structure of the front of the primary TWs are shown in Fig. 3.16 and in Fig. 3.17. The complete flow fields are shown in Figs. 3.1 and 3.3, respectively. Transverse waves 1, 2, 3, etc. of the “fine” structure are detonation waves, as are TWs in single-fuel methane mixtures in Figs. 3.11, 3.13–3.15.

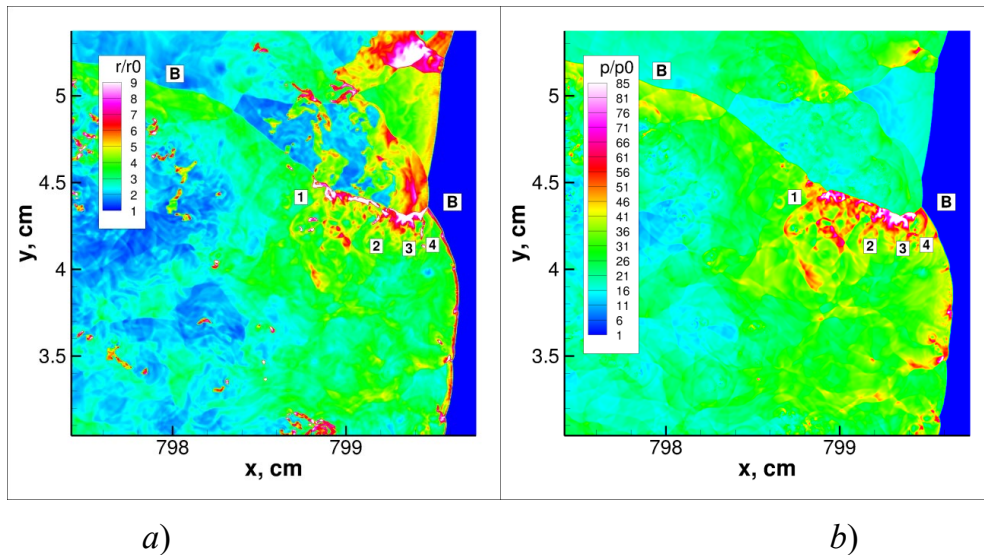
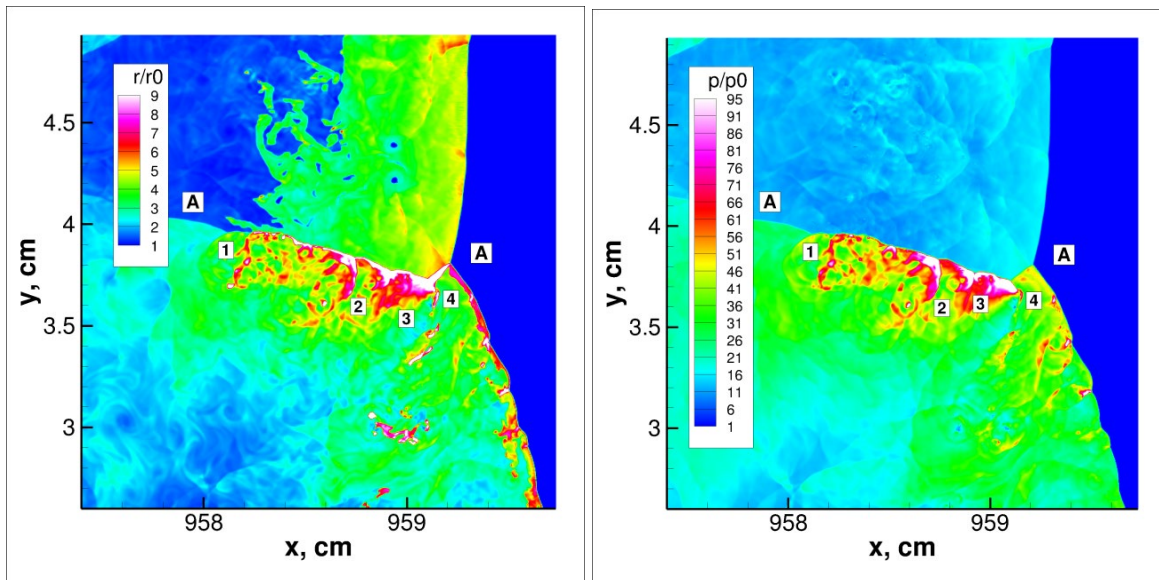


Fig. 3.16. Magnified fragment of primary TW BB structure in a $0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1,1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$ mixture, $\alpha=0,6$, $a_0=H=7$ cm, $x_{fj}=800$ cm (see Fig. 3.1):

- a) normalized density flowfield;
- b) numerical Schlieren visualization of flowfield.

Figure 3.18 shows an enlarged fragment of the TW front structure in the mixture with $\alpha = 0,8$, presented in Fig. 3.6. It has a «fine» structure. In this case, the transverse waves (marked with numbers) behind the primary TW are shock waves, i.e., non-reacting shocks in induction zone. As the percentage of hydrogen in the mixture increases, the detonation waves transform into shock waves.



a)

b)

Fig. 3.17. Magnified fragment of primary TW AA structure in a $0,6\text{H}_2 + 0,4\text{CH}_4 + 1,1(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$ mixture, $\alpha=0,6$, $H=7,5$ cm, $x_{fr}=960$ cm (see Fig. 3.3):

- a) normalized density flowfield;
- b) numerical Schlieren visualization of flowfield.

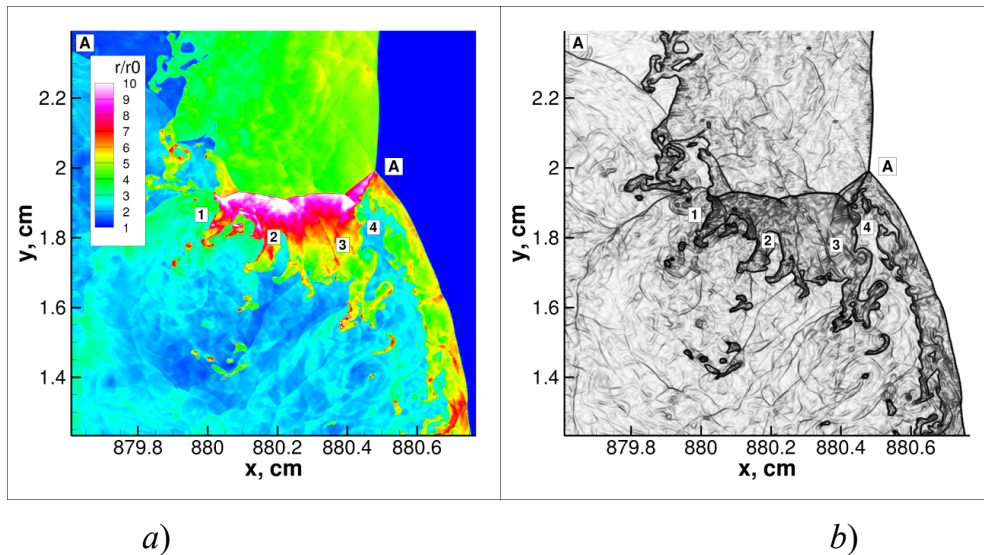


Fig. 3.18. Magnified fragment of TW AA structure in a $0,8\text{H}_2 + 0,2\text{CH}_4 + 0,8(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$ mixture, $\alpha=0,8$, $H=3,25$ cm, $x_{fi}=881$ cm (see Fig. 3.6):
 a) normalized density flowfield; b) numerical Schlieren visualization of flowfield.

Analysis of the results for the two-dimensional structure of DWs in the mixtures studied suggests that if the leading edge of a DW has a «fine» structure, then it is very likely that the primary transverse waves at the DW front will also have a «fine» structure.

3.7. Conclusions and acknowledgements

A two-stage generalized model of the kinetics of detonation combustion of binary methane-hydrogen mixtures with oxidizer has been developed. Owing to the simplicity and high accuracy, the model can be used in multi-dimensional numerical modeling of detonation flows.

A numerical simulation of a two dimensional structure of the detonation wave in a stoichiometric methane–hydrogen-oxidizer dual-fuel mixture with varying ratio of the fuels and a wide range of channel height has been performed. Chemical transformations are described by proposed kinetic model.

The calculated detonation cell size and the qualitative irregular structure of the detonation wave are in good agreement with experiment.

The calculation results show that at sufficiently high concentrations of methane, the leading shock front of the DW and the primary transverse waves can have «fine» structures. The known experimental criterion for the existence of a «fine» structure of the leading edge of the DW has been confirmed. If the leading DW front has a «fine» structure, then it is very likely that the primary TWs will also have a «fine» structure.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ВРАЩАЮЩЕЙСЯ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В СИНТЕЗ-ГАЗЕ

Предложенная обобщенная модель кинетики для синтез-газа использована в рамках численного моделирования непрерывно вращающейся детонации стехиометрической двухтопливной смеси с воздухом в цилиндрической кольцевой детонационной камере (ДК) ракетного двигателя [71]. Исследована общая структура течения в детонационной камере (ДК) и детальная структура фронта ПВ в непрерывно вращающемся режиме. Получены интегральные характеристики детонационного процесса – распределение средних значений статического и полного давления по длине ДК, а также величина удельного импульса. Определены область существования устойчивого непрерывного детонационного режима в координатах давление торможения – температура в нагнетательном коллекторе (ресивере) и геометрический предел устойчивого ПВ.

Напомним, что в настоящее время существует несколько различных концепций детонационного двигателя. В первой концепции нестационарное горение смеси происходит во вращающихся поперечных детонационных волнах (ВПД) в кольцевой цилиндрической детонационной камере (ДК) [72, 73]. Эта концепция двигателя может быть реализована как по ракетному, так и по проточному типу. По-другому этот процесс часто называют непрерывной спиновой детонацией или непрерывно вращающейся детонацией (НВД). Вторая концепция применима только к проточному детонационному двигателю и использует стационарные косые детонационные волны (КДВ), образующиеся над поверхностью различных тел сжатия различной геометрии при сверхзвуковой подаче реагирующей смеси. Третья концепция основана на периодическом инициировании нестациона-

нарно распространяющихся ДВ в канале ДК импульсно-детонационного двигателя (ИДД). Реализация ИДД возможна как для ракетного, так и для проточного варианта подачи свежей смеси.

Представленные ниже результаты расчетов непрерывно вращающейся ДВ в цилиндрической кольцевой камере ракетного двигателя выполнены для смеси (2.1) при $\alpha = 0,1$. Основной целью было исследование возможности детонационного горения этой весьма труднодетонирующей смеси (рассчитанный нами размер ячейки при стандартных начальных условиях составляет 25 мм (см. пункт 2.3 Монографии и [74, 75]), что весьма близко к экспериментальным данным [53, 76]).

Численные исследования НВД в цилиндрической кольцевой ДК проведены в двумерном приближении. Предполагается, что размер кольцевого зазора Δ много меньше среднего диаметра ДК d_{DC} , $\Delta \ll d_{DC}$.

В двумерных численных расчетах используется фиксированная сетка, равномерная в обоих направлениях.

На входной границе камеры сгорания $y=0$ расположена система микросопел Лавалья, питаемых из инжекционного коллектора (ресивера) свежей предварительно перемешанной газовой смесью. Алгоритм работы микросопел в зависимости от давления торможения p_m и температуры торможения T_m в коллекторе, а также противодавления на входной границе камеры сгорания подробно описан в [72, 73]. На выходной границе $y=N_{DC}$ расположены виртуальные внешние ячейки сетки с низким противодавлением, что обеспечивает критический истечение газа с этой границы в окружающее виртуальное пространство.

На левой $x=0$ и правой $x=W_{DC}=\pi \cdot d_{DC}$ границах заданы периодические граничные условия.

Коды распараллелены с помощью библиотеки MPI с использованием метода “domain decomposition”. При моделировании с нормальным разрешением общее количество числовых ячеек по осям x и y составляло

$N_x=1536$ и $N_y=768$ соответственно. При моделировании с высоким разрешением общее количество ячеек было вдвое больше.

Результаты расчета и дискуссия. Многочисленные численные эксперименты показали, что устойчивый режим детонационного горения в смеси синтез-газа с воздухом оказался возможным лишь при достаточно больших размерах ДК и достаточно высоких значениях давления и температуры торможения в коллекторе. При этом был получен эффект влияния длины ДК на устойчивость режима детонации. Этот результат полностью согласуется с экспериментальными наблюдениями [72].

Продемонстрируем этот эффект на примере режима детонации для ДК с $H_{DC} = 60$ см, $W_{DC} = 120$ см и $S^*/SDC = 0,1$, где SDC - площадь поперечного сечения кольцевого канала ДК, S^* - общая площадь горла микросопел. Во всех остальных наших расчетах значение S^*/SDC оставалось неизменным. Параметры смеси в коллекторе составляют $p_m = 15$ атм, $T_m = 900$ К. При этих параметрах ДК и коллектора режим НВД не поддерживается. На рисунке 4.1 показана динамика давления, зарегистрированная виртуальным точечным манометром, расположенным в точке $x = 0, y = 0$. Приведены значения статического (красная линия) p и «полного» давления (синяя линия) $p_{tot} = p + \rho \cdot u_y^2$. Каждый пик на этой записи соответствует прохождению фронта ДВ через манометр; Время между пиками – это период вращения ВПД Δt . Разница в величине давления в пиках обусловлена внутренней многофронтной структурой ВПД (см. рисунок 4.2) и дискретностью считывания данных с виртуального датчика.

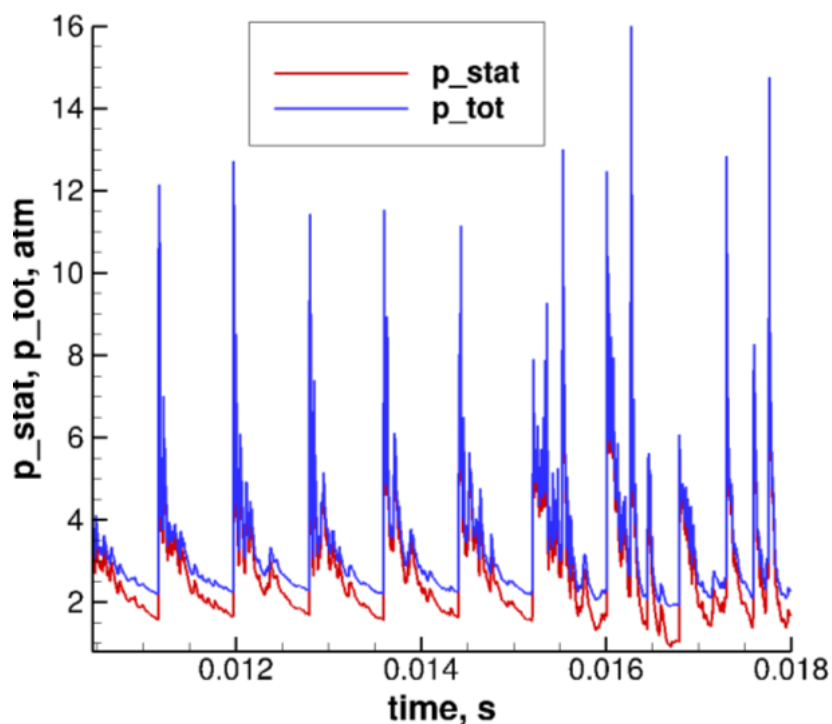


Рис. 4.1. Динамика статического давления p_{stat} и полного давления p_{tot} (атм) в точке $x=0$, $y=0$ при $H_{DC}=60$ см, $W_{DC}=120$ см.

На рисунке 4.1 видны регулярные пики давления примерно до момента времени $t=15$ мс, что свидетельствует об устойчивости режима НВД. Структура течения внутри ДК в момент времени $t=15$ мс представлена на рис. 4.2, там же представлено температурное поле течения. Здесь мы видим многофронтную ВПД высотой около $h=25$ см и классический «треугольник» свежей смеси перед ней. Однако после этого момента закономерность максимумов давления нарушается. Анализ полей течения показывает, что в этот временной интервал происходит резкое необратимое увеличение длины зоны индукции, отрыв зоны тепловыделения от переднего фронта ударной волны ВПД. Это в конечном итоге приводит к срыву детонационного режима и вырождению ВПД в слабый косой скачок давления, показанный на рисунке 4.3 при $x=50$ см для $t=18$ мс.

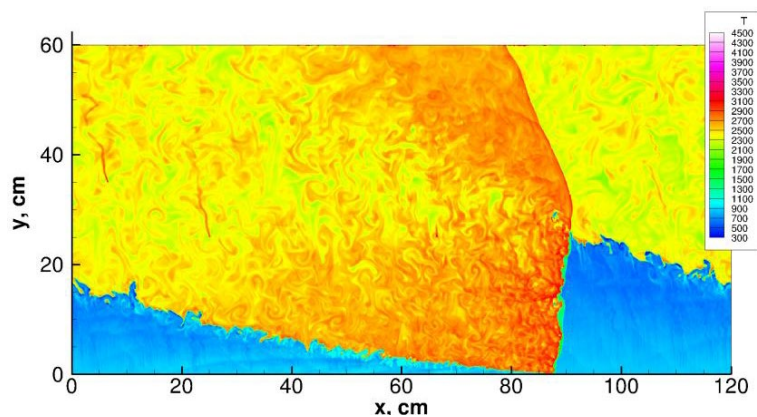


Рис. 4.2. Структура вращающейся детонационной волны в детонационной камере, $H_{DC}=60$ см, $W_{DC}=120$ см. Поле температуры (К) при $t=15$ мс.

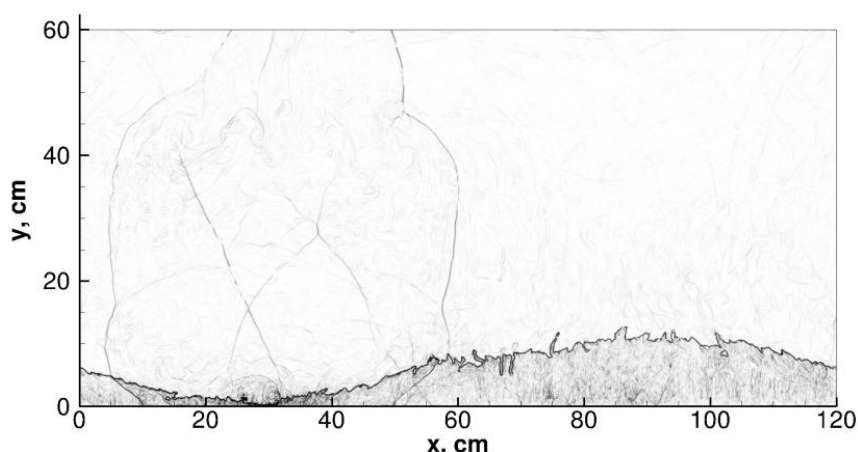


Рис. 4.3. Структура вращающейся детонационной волны в детонационной камере с $H_{DC}=60$ см, $W_{DC}=120$ см. Численная шпирен-визуализация поля течения при $t=18$ мс.

Увеличение длины ДК от $H_{DC}=60$ см до $H_{DC}=100$ см приводит к стабилизации режима ВПД. Значения $p_m=15$ атм, $T_m=900$ К остаются прежними. На рисунке 4.4 представлена история давления, которая показывает регулярные по времени пики давления от $t=15$ мс до $t=30$ мс. Всего ВПД совершила 18 полных циркуляций. Средний период вращения ВПД со-

ставляет $\Delta t=810,7$ мкс, что соответствует средней скорости детонации $D_{aver}=1480$ м/с. На рисунке 4.5 показано поле нормированной плотности в ДК в момент времени $t=20$ мс, а на рисунке 4.6 – поле температуры (К) в момент времени $t=30$ мс. На этих рисунках показана устойчивая многофронтная структура ВПД с внутренними поперечными волнами на её фронте. Отмечено лишь незначительное уменьшение высоты ВПД с $h\approx 28$ см для момента $t=20$ мс до $h=25,5$ см для момента $t=30$ мс. Средний по времени удельный массовый расход [72] в ДК на входной границе составляет $\langle g_{\Sigma} \rangle = \langle \rho \cdot u_y \rangle = 200$ кг/с·м², средний удельный импульс на выходной границе составляет $\langle I \rangle = 115$ с.

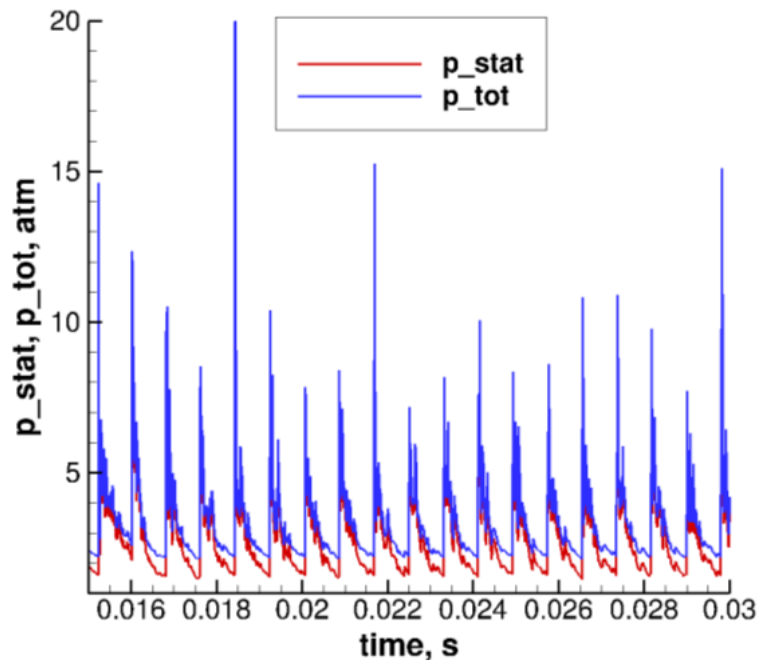


Рис. 4.4. Динамика статического давления p_{stat} и полного давления p_{tot} (атм) в точке $x=0, y=0$ при $H_{DC}=100$ см, $W_{DC}=120$ см

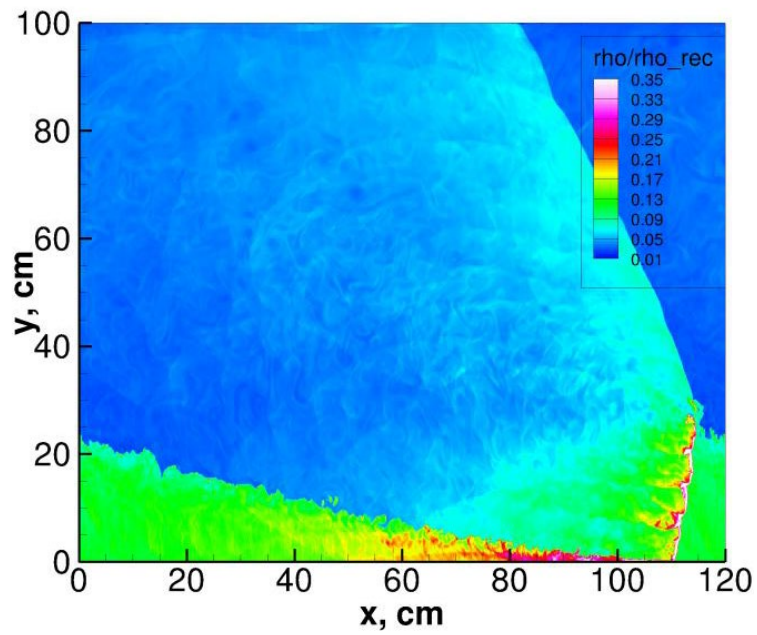


Рис. 4.5. Структура вращающейся детонационной волны в детонационной камере с $H_{DC}=100$ см, $W_{DC}=120$ см. Нормализованная плотность при $t=20$ мс.

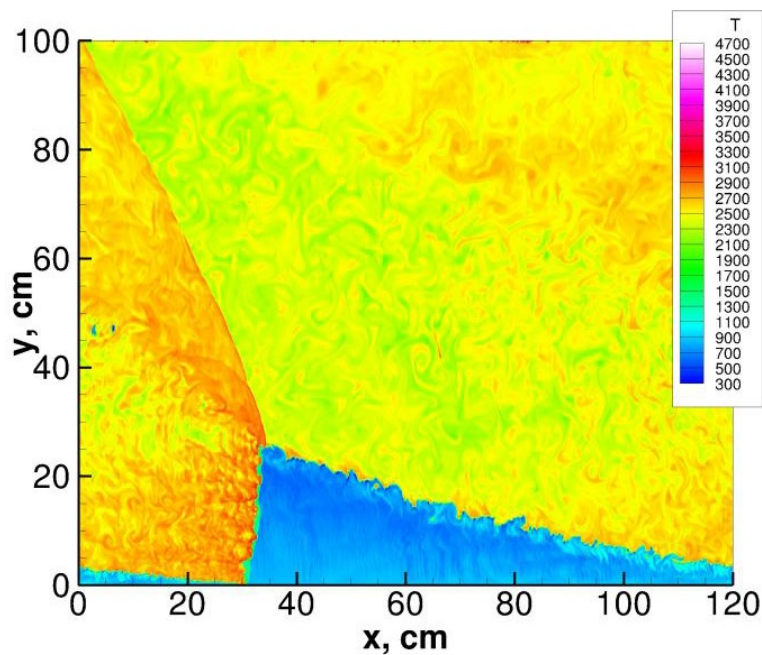


Рис. 4.6. Структура вращающейся детонационной волны в детонационной камере с $H_{DC}=100$ см, $W_{DC}=120$ см. Температура (К) при $t=30$ мс.

Дальнейшие двумерные исследования показали, что с увеличением диаметра ДК возможны устойчивые режимы детонации при меньшем давлении торможения, $p_m = 10$ атм. При параметрах ДК $H_{DC} = 100$ см, $W_{DC} = 200$ см, $p_m = 10$ атм, $T_m = 900$ К получен устойчивый режим вращения ВПД. На рисунке 4.7 представлена динамика давления от $t = 30$ мс до $t = 44$ мс. Средний период вращения ВПД составляет $\Delta t = 1350,7$ мкс, средняя скорость детонации $D_{aver} = 1481$ м/с. На рисунке 4.8 показано температурное поле течения в ДК со стационарно вращающейся многофронтной ВПД высотой $h \approx 45$ см. На фронте ВПД наблюдается примерно 4–5 внутренних поперечных волн. Для этого режима средний удельный расход $\langle g_\Sigma \rangle = 133,3$ кг/с·м², а средний удельный импульс $\langle I \rangle = 88,1$ с.

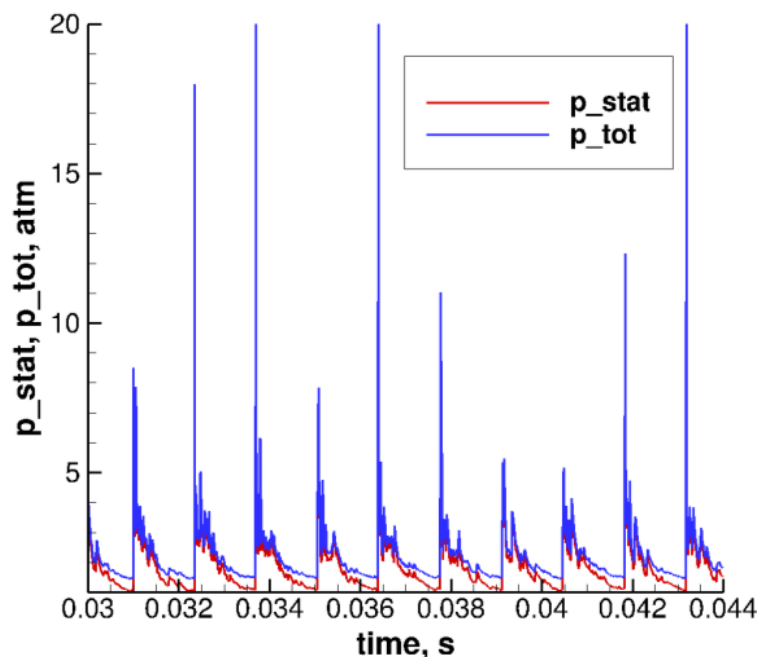


Рис. 4.7. Динамика статического давления p и полного давления p_{tot} (атм) в точке $x = 0$, $y = 0$ для $H_{DC} = 100$ см, $W_{DC} = 200$ см.

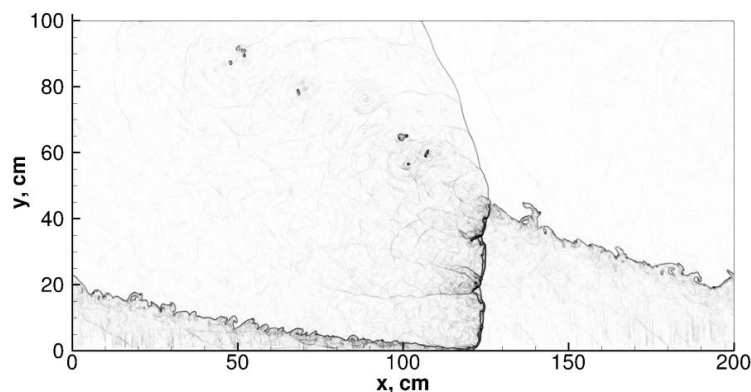


Рис. 4.8. Структура вращающейся ДВ в детонационной камере с $H_{DC}=100$ см, $W_{DC}=200$ см. Численная шпирен-визуализация поля течения при $t=44$ мс.

Выводы по четвертой главе

Выполнено моделирование вращающейся детонационной волны в цилиндрической камере сгорания. Подобное моделирование, сделанное впервые, стало возможным, поскольку использована обобщенная модель кинетики для синтез-газа, предложенная во второй главе.

Рассчитаны параметры и определены условия существования НВД. Устойчивый режим НВД реализуется в достаточно больших по размерам ДК при высоких значениях давления и температуры в коллекторе. Для совершенствования непрерывных детонационных двигателей необходимо найти устойчивые режимы НВД при более низких начальных параметрах в системе подачи свежей смеси.

5. ДЕТОНАЦИОННАЯ КИНЕТИКА СИЛАНА И ПЕРЕКИСИ ВОДОРОДА. ПРИМЕРЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЕТОНАЦИОННЫХ ТЕЧЕНИЙ

5.1. Обобщенная модель кинетики для силано-воздушной смеси

В Главах 1 и 2 представлены обобщенные модели кинетики детонационного сгорания бинарных смесей CO-H₂ и CH₄-H₂. Несмотря на свою простоту, они являются мощным инструментом для описания химических превращений в детонационной волне. Что и продемонстрировано на численных расчетах многофронтных детонационных волн. Причем для построения рассматриваемых кинетических моделей потребовалась только аррениусовская формула для расчета периода индукции. Вид брутто-реакции подбирается на основании хорошо известных энтальпий образования компонент. Никаких дополнительных кинетических констант не требуется. Подобный подход может быть работоспособен и для широчайшего диапазона других углеводородов.

В то же время эта идея не будет распространяться на одно- и много-топливные смеси, имеющие бифуркационную (двухразмерную) ячеистую структуру. Как известно, бифуркационная структура связана с немонотонным тепловыделением в зоне индукции [77]. В то же время предлагаемые кинетические модели обеспечивают монотонное (хотя и небольшое) тепловыделение в индукционной зоне.

По-видимому, еще одним примером, для которого использованный подход для разработки обобщенных кинетических моделей может быть неправилен, является детонационное горение силана.

Силан (SiH₄) относится к важнейшим газообразным источникам кремния в полупроводниковой и фотоэлектронной промышленности. От чрезвычайно

взрывоопасен. Его взрывное поведение далеко не всегда прогнозируемо и зависит от многих факторов: температуры, влажности, освещенности [78]. Возможно, некоторые важные параметры, влияющие на взрывобезопасность силана, еще не установлены. Высокая взрывоопасность силана приводит к неконтролируемым взрывам при его утечках. Причем взрывы могут развиваться и по детонационному сценарию. К сожалению, экспериментальные исследования детонационной волны в силане находятся на начальной стадии.

Рассчитать параметры детонации Чепмена-Жуге в силановых смесях можно по имеющимся (в том числе и в открытом доступе) универсальным компьютерным кодам типа [43]. В то же время размер детонационной ячейки в силане еще не измерен.

Теоретическая оценка размера ячейки в силановых смесях сделана в наших работах [79-81] по известной алгебраической формуле Васильева-Николаева [3]. В то же время численного двумерного расчета многофронтной структуры в силане до сих пор не проведено.

Двумерного численного расчета ячеистых детонационных структур в силане на основе детальной кинетики в среднесрочной (а уж тем более ближайшей) перспективе ожидать не стоит по тем же причинам, по которым подобные расчеты являются единичными для углеводородов. Они неоднократно отмечены в Главах 1 и 2 настоящей Монографии. Поэтому нами начата разработка обобщенной кинетической модели для детонационного сгорания силана. В дальнейшем это даст возможность рассчитать двумерную детонационную структуру. Модель изложена в [82-84]. Рассмотрена смесь $\text{SiH}_4 + a\text{O}_2 + b\text{N}_2$, $a \geq 2$.

Модель разработана на основе того же подхода, что и описанные в настоящей Монографии обобщенные модели для CH_4 , CO-H_2 и $\text{CH}_4\text{-H}_2$. В частности, реакция разделена на две части. Использована аррениусовская формула для расчета периода индукции. Предложен вид брутто-реакции химической трансформации силана на более простые компонен-

ты. И так далее. При этом (за неимением другого варианта) вид аррениусовской формулы и ее константы подобраны на основании расчетов по детальной кинетике при детонационных давлениях и температурах. Конкретный вид брутто-реакции следующий:



Предложенная модель использована для расчета одномерной структуры детонационной волны Чепмена-Жуге в стехиометрической силановоздушной смесисмеси. Для сравнения, аналогичный расчет сделан с учетом известной детальной кинетической модели. Результаты расчетов приведены на рис. 5.1 – 5.3.

На рис. 5.1, 5.2 представлены профили параметров волны вплоть до чисел Маха порядка $0,85 \div 0,9$. Переход через звук в одномерной детонационной волне без потерь происходит на бесконечности. Поэтому показана лишь область течения, в которой имеют место значительные изменения параметров потока. Рис. 5.3 более мелкого масштаба и дает представление о характере течения в районе переднего ударного фронта. Давление P и температура T на рис. 5.2, 5.3 нормированы на соответствующие величины за передним ударным фронтом. Для детальной кинетики это 32,85 атм и 1943 К. Для обобщенной модели – 32,71 атм и 1944 К.

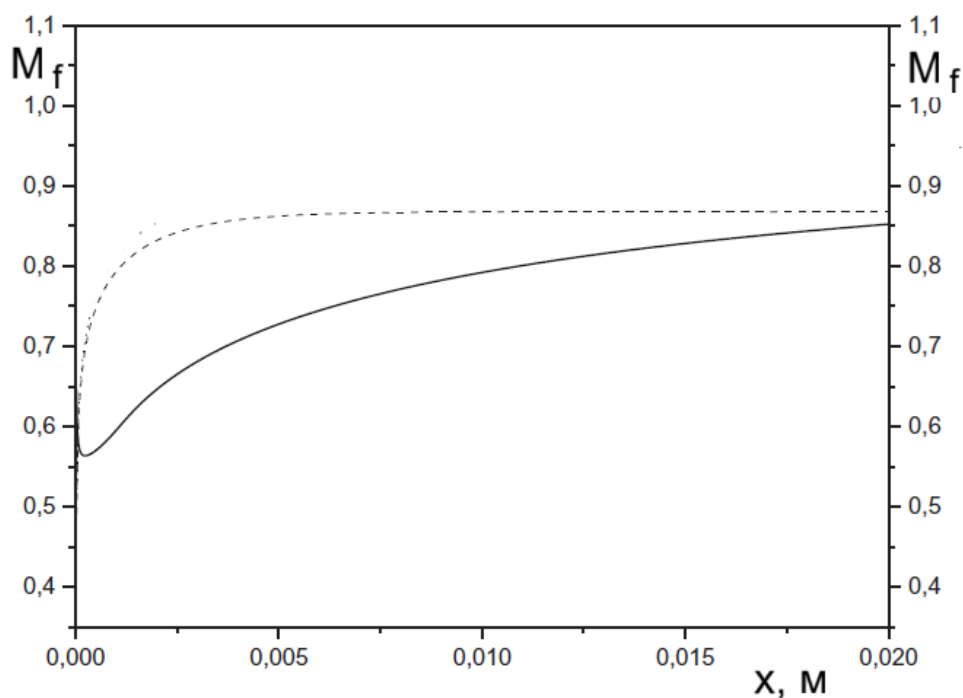


Рис. 5.1. Профили «замороженного» числа Маха потока за фронтом одномерной волны Чепмена-Жуге в смеси $\text{SiH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, рассчитанные с учетом детальной кинетики (сплошная кривая) и обобщенной кинетической модели (штриховая кривая).

Расчет Д.В. Тропина.

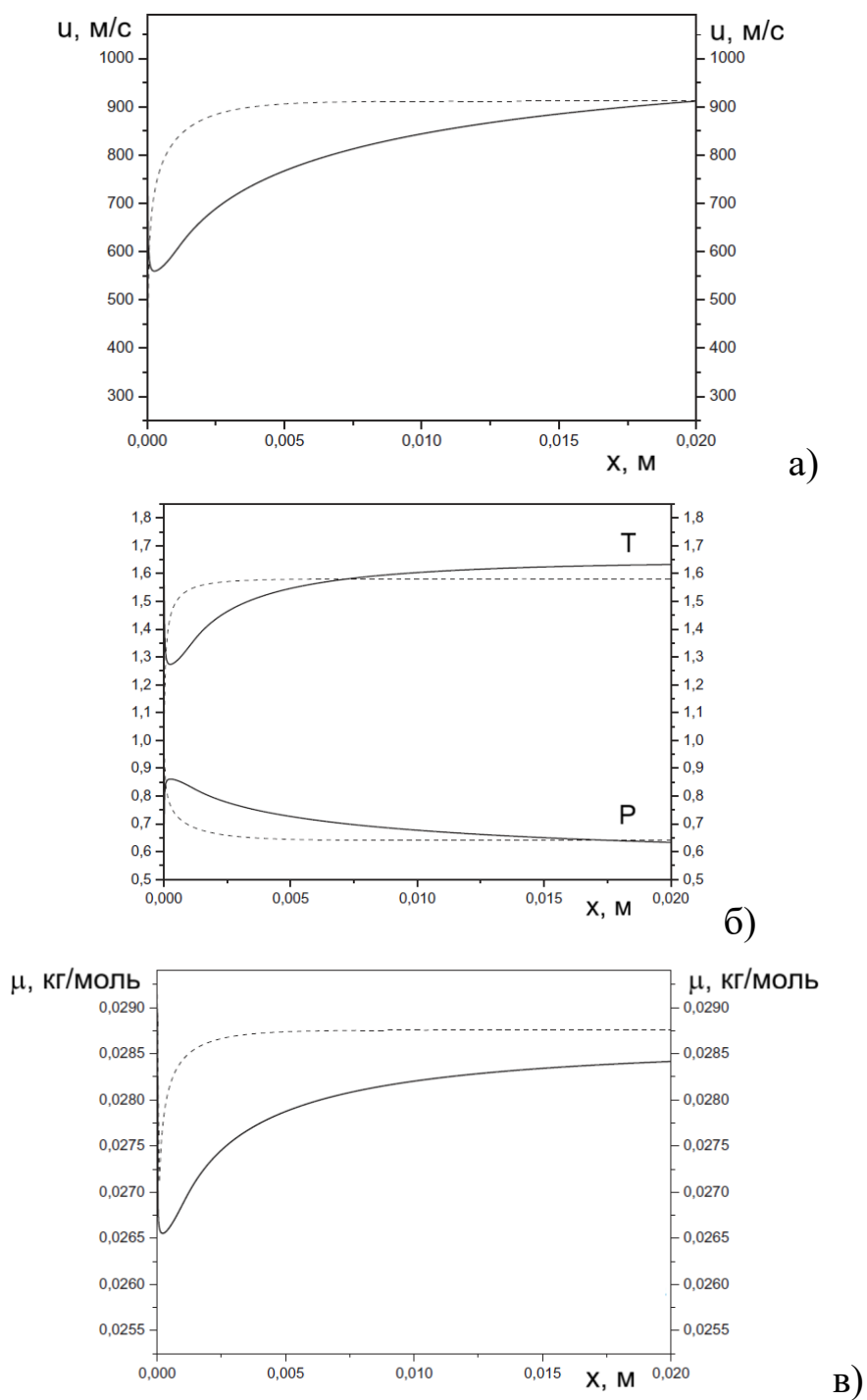


Рис. 5.2. Одномерные профили параметров волны Чепмена-Жуге в стехиометрической силано-воздушной смеси $\text{SiH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, рассчитанные с учетом детальной кинетики (сплошные кривые) и обобщенной кинетической модели (штриховые кривые).

Расчет Д.В. Тропина.

а) скорость потока, б) нормированные давление и температура газа, в) молярная масса смеси.

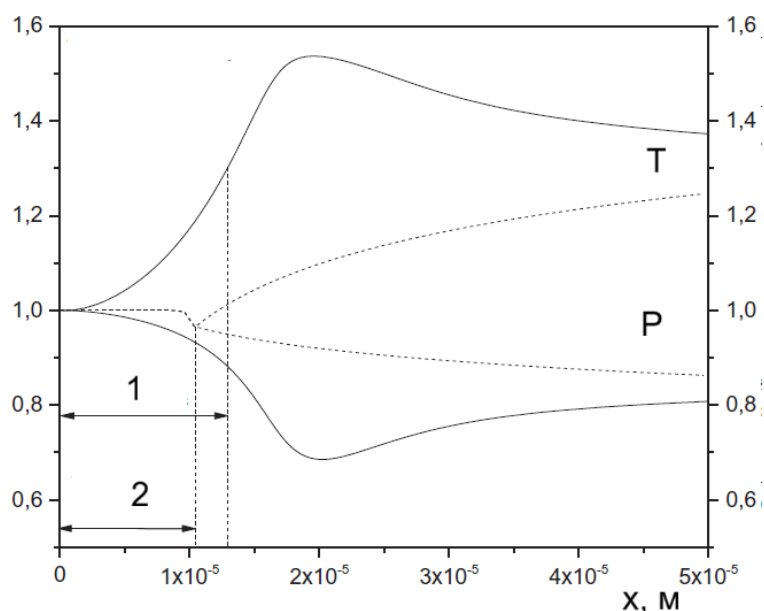


Рис. 5.3. Одномерные профили нормированных температуры и давления газа в волне Чепмена-Жуге в стехиометрической силано-воздушной смеси $\text{SiH}_4 + 2(\text{O}_2 + 3,76\text{N}_2)$, рассчитанные с учетом детальной кинетики (сплошные кривые) и обобщенной кинетической модели (штриховые кривые). Расчет Д.В. Тропина.

По мере приближения к плоскости Чепмена-Жуге параметры потока, рассчитанные с учетом детальной кинетики и обобщенной модели, сближаются (рис. 5.2). Это не удивительно. Во-первых, предложенные нами обобщенные кинетические модели рассчитывают химическое равновесие очень хорошо. В рамках предложенной обобщенной модели для силана химическое равновесие рассчитывается по тем-же формулам, и (это нами проверено), столь же точно. Во-вторых, если смесь находится в состоянии химического равновесия, то дифференциальные уравнения детальных кинетических моделей переходят в алгебраическую систему уравнений химического равновесия. Поэтому и результаты расчета параметров потока в плоскости Чепмена-Жуге, выполненные по детальной кинетической схеме, близки к соответствующим расчетам с детальными уравнениями химического равновесия [43]. Так,

скорость детонации, рассчитанная по детальной кинетике, равна 1844 м/с, а по обобщенной модели – 1840 м/с. Давление и температура в точке Чепмена-Жуге, рассчитанные по детальной кинетике равны 19,22 атм и 3060 К, а по обобщенной кинетике – 20,95 атм и 3073 К соответственно. Видно, что соответствие очень хорошее.

Наибольшее расхождение между кривыми, относящимися к детальной и обобщенной кинетикам, имеет место в периоде индукции. Детальная кинетика дает рост температуры в индукционной зоне, в то время как обобщенная – практически нет.

Отсутствие экспериментальных данных по изучению ячеистых детонационных структур в силановых смесях (экспериментальные работы по детонации силана только начинают появляться [85]) вынуждает нас при построении обобщенной кинетической модели ориентироваться только на детальную кинетику. Необходимо как усовершенствование обобщенной кинетической модели, так и проведение дополнительных расчетов динамики тепловыделения и параметров потока, прежде всего в индукционной зоне, по различным детальным кинетическим схемам. Экспериментальные исследования ячеистой структуры в силане, прежде всего ответ на вопрос, насколько она нерегулярна и не является ли бифуркационной, совместно с измерением a_0 , позволят сделать заметный шаг вперед в создании и верификации обобщенной модели.

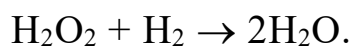
5.2. Моделирование бифуркационной ячеистой структуры в бинарной смеси $\text{H}_2\text{-H}_2\text{O}_2$ с O_2 и N_2

Смесь перекиси водорода с водородом является бинарной. Более того, она содержит монотопливо – перекись водорода. Моделирование ее детонационных характеристик напрямую связано с взрывобезопасностью атомных станций, поскольку аварийные ситуации могут, поми-

мо прочего, приводить к разложению воды с образованием водорода и его перекиси. Детонация горючих компонент, образовавшихся при разложении воды, может генерировать мощное импульсное воздействие на защитную оболочку реактора со всеми вытекающими отсюда последствиями.

В нашей работе [86] предложена обобщенная модель кинетики для бинарной газовой смеси $\text{H}_2\text{-H}_2\text{O}_2$ с O_2 и N_2 . Модель построена исходя из тех-же принципов, что и модель кинетики для метана [6, 7] бинарных смесей метан-водород (глава 1), синтез-газ (глава 2).

Полагалось, что в брутто-реакции имеет место разложение перекиси водорода:



Подобное разложение оставляет молярную массу смеси в индукционной зоне постоянной, но, в то же время, выделяет тепло.

Описанная модель была использована для расчета многофронтной детонационной волны в бинарной смеси, содержащей, монотопливо. Результат (см. рис. 5.4 и 5.5) получился неожиданным: ячеистая структура оказалась бифуркационной! По-видимому, данный численный расчет был первым, в котором получена бифуркационная ячеистая структура в газовой смеси.

Известно, что детонационная структура является бифуркационной, если имеет место немонотонная зависимость тепловыделения от времени [77, 87]. В то же время, согласно используемой модели кинетики оно монотонно. Так в чем же может быть причина формирования бифуркационной структуры? Это, возможно, связано с тем, что после периода индукции по мере движения смеси вниз по потоку скорость тепловыделения, вызванная изменением молярной массы, на определенное время становится отрицательной. А это ведет к немонотонности тепло-

выделения вблизи зоны индукции, что и способствует формированию двухфронтного режима.

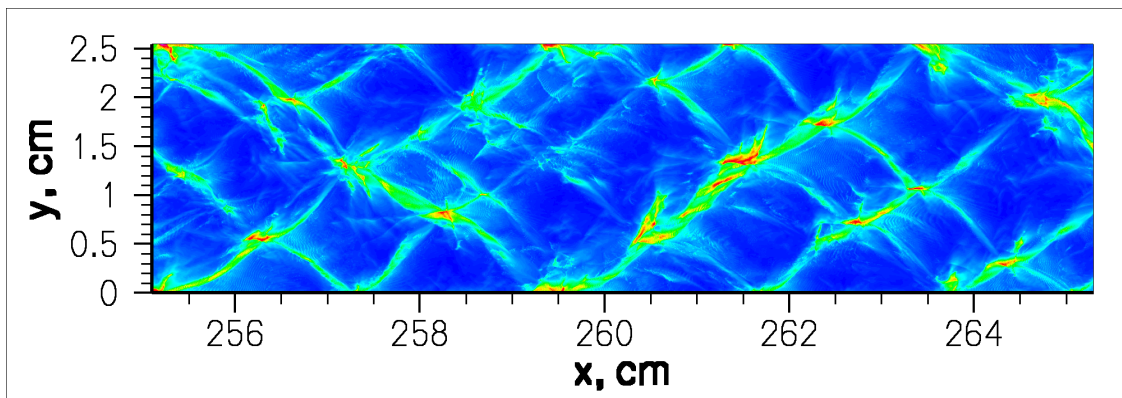
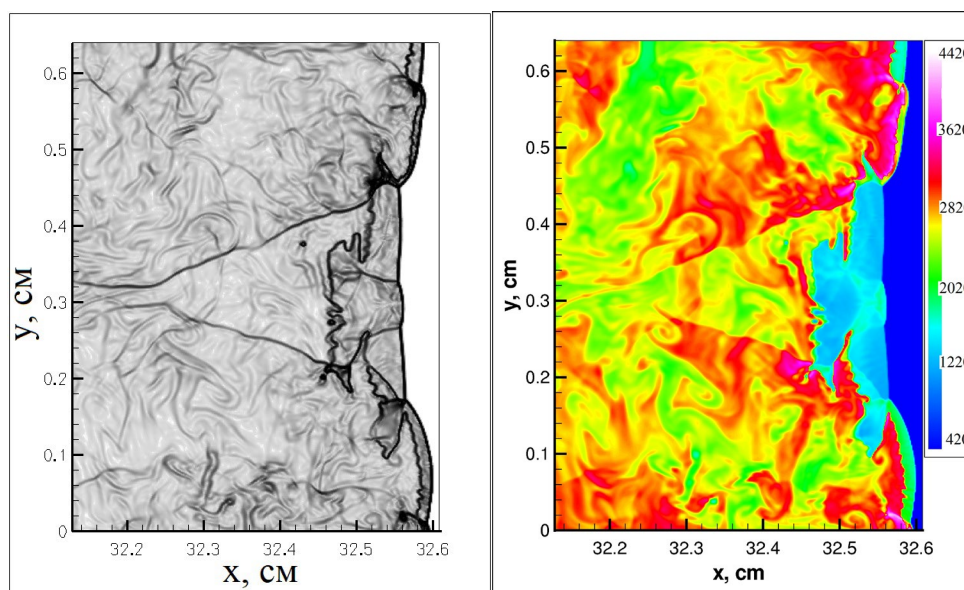


Рис. 5.4. Численный следовой отпечаток бифуркационной ячеистой структуры ДВ, распространяющейся по плоскому каналу шириной 2,5 см. Смесь $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 7\text{Ar} + 1,1111 \text{H}_2\text{O}_2$, начальное давление $P_0 = 50 \text{ Тор}$.



а)

б)

Рис. 5.5. Бифуркационная ячеистая структура в бинарной смеси, содержащей монотопливо. Смесь $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 7\text{Ar} + 1,1111 \text{H}_2\text{O}_2$, ширина канала 0,64 см, начальное давление $P_0 = 0,2 \text{ атм}$. (а) Шлирен, (б) – температура (К).

5.3. Примеры моделирования детонационных течений

В данном параграфе приведем иллюстративные примеры моделирования нескольких детонационных течений, интересных с научной точки зрения и актуальных с точки зрения возможных технических приложений. Моделирование проводилось в рамках решений уравнений Эйлера по численному методу, описанному в главах 1 и 2. Рассматривались водородо-кислородные смеси. Химические превращения описывались по обобщенной модели детонационной кинетики для водорода [35], которая первоначально была верифицирована на расчетах детонационных ячеек в плоских каналах. Данная модель положена в основу излагаемых в настоящей Монографии моделей для метана и бинарных смесей метана с водородом (глава 1) и синтез-газа (глава 2). Эти модели также успешно верифицированы на расчетах ДВ в плоских каналах, а модель для синтез-газа еще и на расчете вращающейся ДВ. Приводимые ниже примеры успешного использования обобщенной модели для водорода дают основание полагать, что предлагаемые в Монографии кинетические модели будут столь же эффективны.

На рис. 5.6 показан результат численного расчета структуры ДВ в канале с поперечным относительно направления распространения волны градиентом химического состава [88]. Градиент состава задается соотношениями: $z\text{H}_2 + \text{O}_2$, $z = 2 + 2\sin(y/H \cdot \pi/2)$, где y – поперечная координата, H – ширина канала. То есть концентрация водорода растет при увеличении поперечной координаты. Начальный химсостав в каждой точке пространства перед фронтом волны известен. Это позволяет для каждой из них рассчитать параметры μ_a , μ_{\min} , μ_{\max} . Величины E и A полагались постоянными и равными соответствующим значениям для стехиометрии.

Из рис. 5.6 видно, что ячеистая структура деформирована и ее нижняя часть расположена несколько сзади верхней части ударного фронта. Это

связано с повышенной скоростью детонации в водородо-кислородной смеси при повышенном содержании водорода. Такая зависимость не работает только для сильно разбавленных горючим смесей. Естественно, верхняя часть волны не может “убежать” от ее придонной части, а тянет ее за собой.

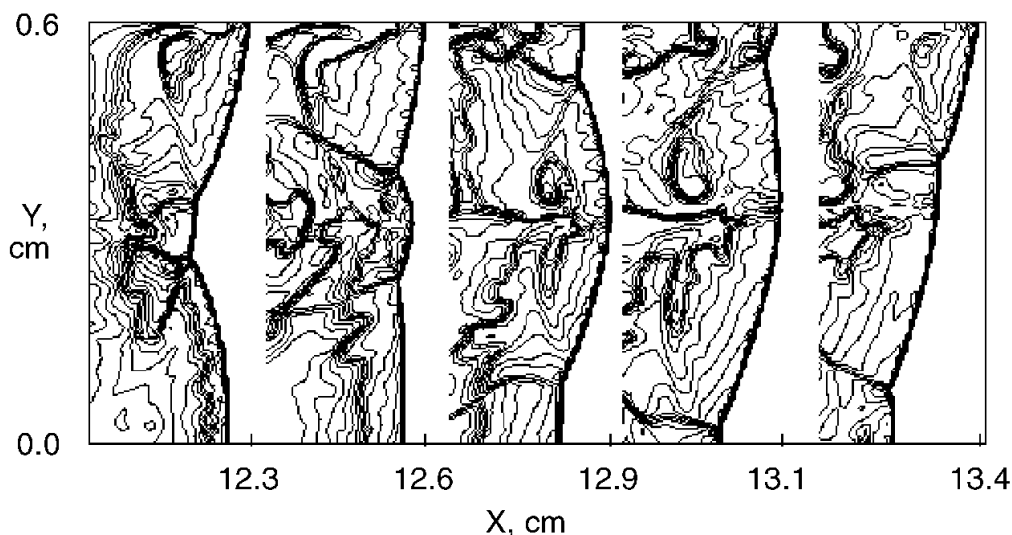


Рис. 5.6. Деформированная ячеистая структура в канале (численный шпирен) в смеси $z\text{H}_2 + \text{O}_2$, $z = 2 + 2\sin(Y/h \cdot \pi/2)$. Численная шпирен-визуализация потока. Начальное давление $P_0 = 0.2$ атм, $h = 0.6$ см.

На рис. 5.7 и 5.8 показаны результаты расчета отражения детонационной волны от клина [89]. Смесь $2\text{H}_2 + \text{O}_2$, начальное давление $P_0 = 0.2$ бар и начальная температура $T_0 = 298.15$ К. Изолинии относительной плотности проведены по уровням $\rho/\rho_0 = 1; 1,5; 1,5 \cdot 1,1; 1,5 \cdot 1,1^2; \dots$, ρ и ρ_0 – текущая и начальная плотность. L - расстояние, пройденное ДВ вдоль клина.

Решение подобного рода задачи актуально для моделирования распространения ДВ внутри сложных каналов или в загроможденном препятствиями пространстве. Кроме того, она связана с идеей получения пересжатых ДВ в каналах с уменьшающимся поперечным сечением. Такие волны

могут применяться в ряде технологических процессов, например, в установках по детонационному нанесению тугоплавких порошковых покрытий.

Расчеты численного расчета впервые позволили объяснить неавтономность движения тройной точки, рассчитать критический угол отражения и предельную высоту маховской ножки.

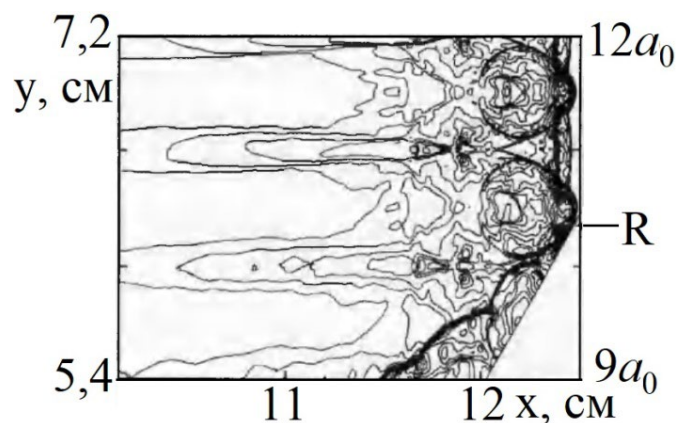


Рис. 5.7. Результат численного расчета регулярного отражения ДВ от клина с углом раствора 60° . Изолинии плотности. Смесь $2\text{H}_2 + \text{O}_2$, $P_0 = 0.2$ бар, $T_0 = 298.15$ К. R – точка пересечения фронта ДВ с поверхностью клина.

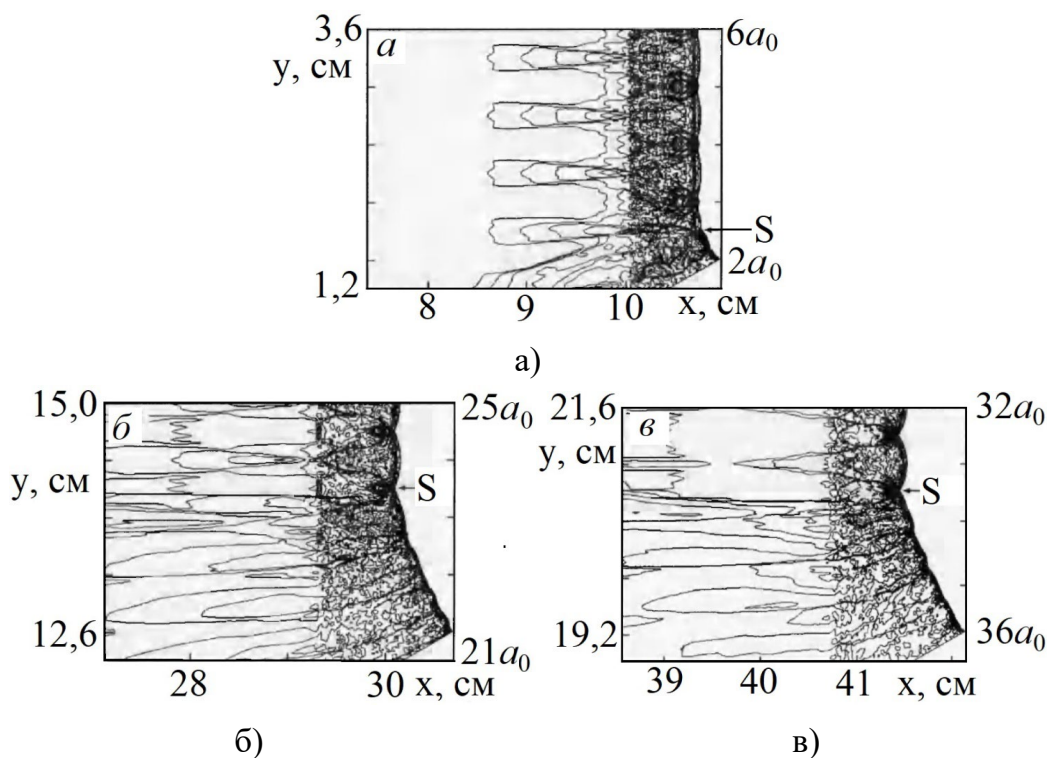


Рис. 5.8. Результат численного расчета нерегулярного (Маховского) отражения ДВ от клина с углом раствора 30° . Изолинии плотности.

Смесь $2\text{H}_2 + \text{O}_2$, $P_0 = 0.2$ бар, $T_0 = 298.15$ К.

а) $L = 4a_0$, б) $L = 42a_0$, в) $L = 64a_0$. S – точка сопряжения ножки Маха и фронта, падающей ДВ.

На рис. 5.9 показаны результаты численного моделирования движения ДВ в двухсекционном канале [90]. Первоначально в плоском, с шириной, равной поперечному размеру ячейки $a_0 = 0,62$ см. Затем в линейно расширяющемся с углом 10 градусов. Смесь $2\text{H}_2 + \text{O}_2$, начальное давление $P_0 = 0.2$ бар, начальная температура $T_0 = 298$ К. Проведенные расчеты позволили описать эффект образования новых поперечных волн и роста числа ячеек.

Данная задача имеет отношение и к проблеме выхода детонации из узкого канала в широкий, и к вопросу о механизме увеличения числа детонационных ячеек по мере расширения поверхности детонационного фронта, например, при сферической детонации.

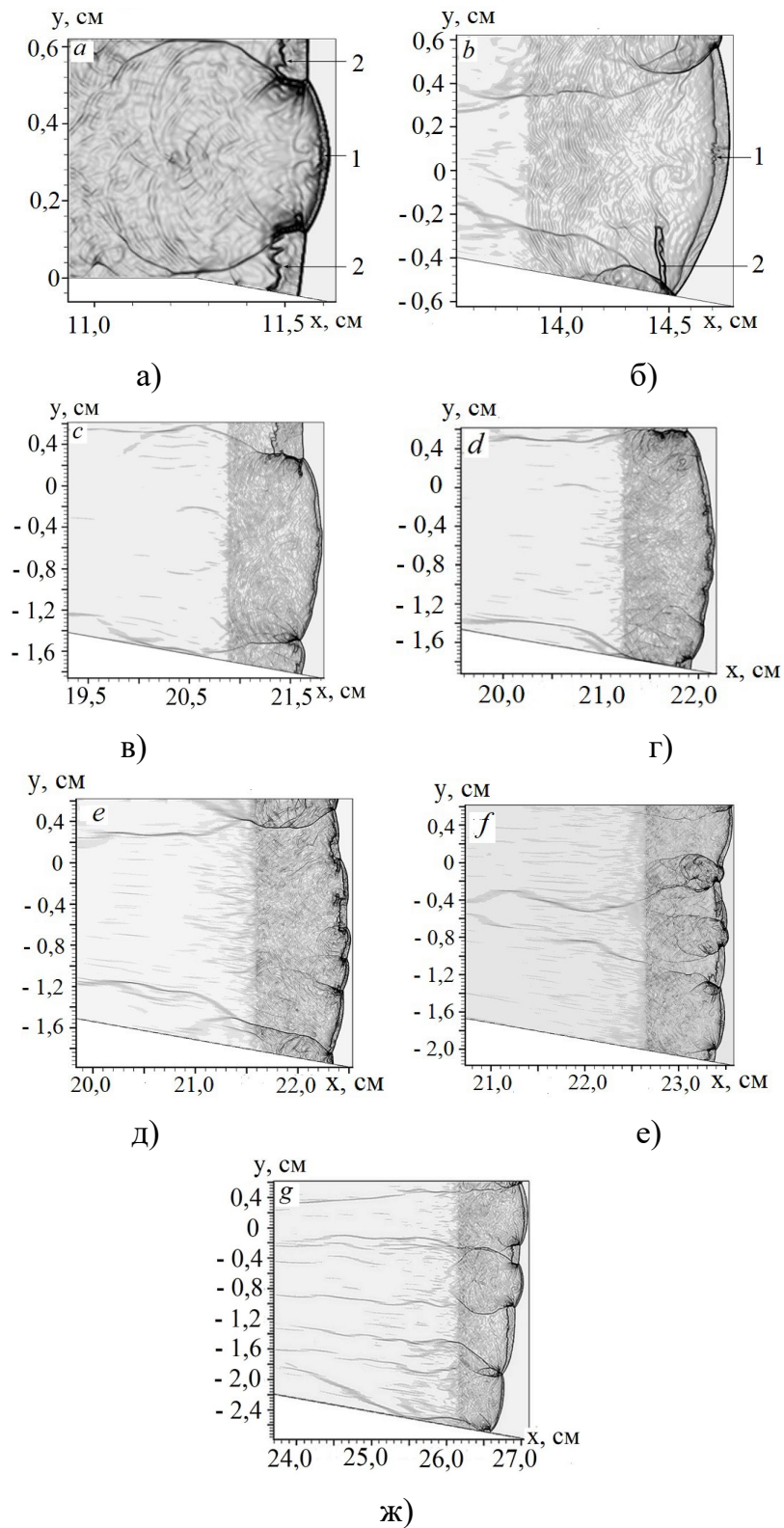


Рис. 5.9. Результат численного расчета движения ДВ в расширяющемся канале. Показана шпирен-визуализация течения.
 а)-ж) соответствуют $H = 1,1a_0, 2a_0, 4a_0, 4,1a_0, 4,2a_0$ и $4,5a_0$,
 где H – ширина расширяющегося канала. 1 – пересжатая ДВ (ножка Маха). 2 –
 затухающий участок фронта ДВ.

Выводы по пятой главе

Представлены обобщенные модели кинетики для (i) силана и (ii) бинарной смеси $\text{H}_2\text{O}_2\text{-H}_2$. В качестве первого этапа построения этих моделей использованы те же подходы, что и для моделей кинетики для CH_4 и бинарных смесей $\text{CH}_4\text{-H}_2$ (глава 1) и CO-H_2 (глава 2). Тем не менее, модели не могут быть завершены без знания аррениусовских формул для расчета периода индукции, и качественной зависимости тепловыделения от времени в индукционной зоне. А именно, монотонна она или нет, от чего зависит существование бифуркационных ячеистых структур. В этой связи стоит отметить, что имеется большой массив экспериментальных и расчетных данных по детонации H_2 , CH_4 и рассмотренных в Монографии смесей $\text{CH}_4\text{-H}_2$ и CO-H_2 , который непрерывно расширяется (см., например, недавние расчетные работы [91-94] для метано-водородных смесей). При этом, к сожалению, экспериментов по измерению ячеистых детонационных структур в силане и бинарной смеси $\text{H}_2\text{O}_2\text{-H}_2$ чрезвычайно мало.

Дополнительно приведен ряд иллюстративных примеров моделирования ДВ в водородо-кислородной смеси при ее движении в неоднородном по химическому составу пространстве, отражении от стенки и выходе из узкого канала в широкий. Они интересны и с научной, и с практической точек зрения. Рассматриваемые примеры успешного использования обобщенной модели кинетики для водорода [43], дают дополнительные основания считать, что и предлагаемые в Монографии кинетические модели будут столь же эффективны, поскольку, в конечном итоге, они базируются на [43].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В монографии сформулирован ряд обобщенных моделей химических превращений в детонационных волнах в ряде бинарных смесей углеводородов с водородом, относящихся к числу наиболее актуальных с точки зрения практического использования газовой детонации. По совокупности своих достоинств предлагаемые модели не имеют аналогов и имеют хорошую перспективу в рамках численного моделирования сложных детонационных течений и расчетах параметров технических устройств, основанных на газовой детонации.

Дальнейшим логичным шагом в развитии представленных кинетических моделей видится их расширение на многотопливные смеси, а также смеси с немонотонным тепловыделением, в которых детонационные структуры являются бифуркационными.

Приведены результаты численного моделирования газовой детонации в бинарных смесях, выполненных с единых позиций описания химических превращений и динамики детонационных волн. Решение подобных задач без использования предложенных кинетических моделей невозможно или крайне затруднительно.

Сделанные расчеты непрерывной вращающейся детонационной волны в цилиндрической камере сгорания представляет собой убедительный практический пример применения разработанных кинетических моделей.

В рамках численного исследования детонации в ряде бинарных смесей получены «тонкие» структуры переднего детонационного фронта и поперечных волн. Возникает естественный вопрос о том, какова роль этих структур в механизме распространения детонационной волны? На настоящий момент определенного ответа на этот вопрос нет. Нужны соответствующие система-

тические экспериментальные и теоретические исследования, которые, вообще говоря, находятся в самом начале. Выскажем лишь самые общие соображения на этот счет. «Тонкие» структуры связаны с наличием дополнительных поперечных скачков на переднем детонационном фронте и поперечных волнах. А скачки – это, в определенной мере, «горячие точки», которые повышают давление, температуру и могут интенсифицировать или инициировать химические превращения. Соответственно, «тонкие» структуры должны проявлять себя в переходных детонационных процессах наподобие дифракции волны или ее инициирования. Оснований высказаться более определенно у нас нет. Остается открытым и вопрос о влиянии «тонких» детонационных структур на технические приложения газовой детонации. Последующие исследования «тонких» структур должны дать ответ и на этот вопрос.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. F. A. Bykovskii, S. A. Zhdan, E. F. Vedernikov. Continuous Detonation of Methane/Hydrogen-Air Mixtures in an Annular Cylindrical Combustor. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. – 2018. – V. 54, № 4. – P. 472–481. doi: <https://doi.org/10.1134/S0010508218040111>. Ф. А. Быковский, С. А. Ждан, Е. Ф. Ведерников. Непрерывная детонация смесей метан/водород-воздух в кольцевой цилиндрической камере сгорания. *Физика горения и взрыва*. – 2018. – Т. 54, № 4. – С. 96–106. doi: [10.15372/FGV20180411](https://doi.org/10.15372/FGV20180411).

2. F. A. Bykovskii, S. A. Zhdan, E. F. Vedernikov. Continuous Detonation of CH₄/H₂-Air Mixtures in an Annular Combustor with Varied Geometry. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. – 2020. – V. 56, № 5. – P. 537–544. doi: [10.1134/s0010508220050056](https://doi.org/10.1134/s0010508220050056). Ф. А. Быковский, С. А. Ждан, Е. Ф. Ведерников. Непрерывная детонация смесей метан/водород-воздух при варьировании геометрии кольцевой камеры сгорания. *Физика горения и взрыва*. – 2020. – Т. 56, № 5. – С. 49–56. doi: [10.15372/FGV20200505](https://doi.org/10.15372/FGV20200505).

3. Yu. A. Nikolaev, A. A. Vasil'ev, V. Yu. Ul'yanitskii. Gas Detonation and its Application in Engineering and Technologies (Review). *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. – 2003. – V. 39, № 4. – P. 382–410. doi: <https://doi.org/10.1023/A:1024726619703>. Ю. А. Николаев, А. А. Васильев, В. Ю. Ульяницкий. Газовая детонация и ее применение в технике и технологиях (обзор). *Физика горения и взрыва*. – 2003. – Т. 39, № 4. – С. 22-54.

4. A. A. Vasil'ev, V. A. Vasiliev. Multifuel Systems: Methane–Hydrogen–Steam. Combustion, Explosion, and Shock Waves. – 2021. – V. 57, № 1. – P. 14–22. doi: <https://doi.org/10.1134/S0010508221010020>. А. А. Васильев, В. А. Васильев. Многотопливные системы: метан-водород-водяной пар. Физика горения и взрыва. – 2021. – Т. 57, № 1. С. 17–26. doi: 10.15372/FGV20210102.

5. A. V. Trotsyuk. Numerical simulation of the structure of two-dimensional gaseous detonation of an H₂–O₂–Ar mixture. Combustion, Explosion, and Shock Waves. – 1999. – V. 35, № 5. – P. 549–558. <https://doi.org/10.1007/BF02674500>. А. В. Троцюк. Численное моделирование структуры двумерной газовой детонации смеси H₂-O₂-Ar. Физика горения и взрыва. – 1999. – Т. 35, № 5. С. 93–103.

6. P. A. Fomin, A. V. Trotsyuk, A. A. Vasil'ev Approximate model of chemical reaction kinetics for detonation processes in mixture of CH₄ with air. Combustion Science and Technology. – 2014. – V. 186, № 10–11. – P. 1716–1735. doi: 10.1080/00102202.2014.935643.

7. A. V. Trotsyuk, P. A. Fomin, A. A. Vasil'ev Numerical study of cellular detonation structures of methane mixtures. Journal of Loss Prevention in the Process Industries. – 2015. – V. 36. – P. 394–403. doi: 10.1016/j.jlp.2015.03.012.

8. I. A. Bedarev, K. V. Rylova, A. V. Fedorov. Application of detailed and reduced kinetic schemes for the description of detonation of diluted hydrogen–air mixtures. Combustion, Explosion, and Shock Waves. – 2015. – V. 51, № 5. – P. 528–539. doi: <https://doi.org/10.1134/S0010-508215050032>. И. А. Бедарев, К. В. Рылова, А. В. Федоров. Применение детальных и приведенных кинетических схем для описания детонации водородовоздушных смесей с разбавителем. Физика горения и взрыва. – 2015. – Т. 51, № 5. – С. 22–33. doi: 10.15372/FGV20150503.

9. S. P. Borisov, A. N. Kudryavtsev, A. A. Shershnev. Comparison of Detailed Chemical Models of Hydrogen Combustion in Numerical Simulations of Detonation. *Combust Explos Shock Waves*. – 2021. – V. 57, № 3. – P. 270–284. doi: <https://doi.org/10.1134/S0010508221030023>. С. П. Борисов, А. Н. Кудрявцев, А.А. Шершнеv. Сравнение детальных кинетических моделей горения водорода при численном моделировании детонации. *Физика горения и взрыва*. – 2021. – Т. 57, № 3. – С. 18-33. doi: [10.15372/FGV20210302](https://doi.org/10.15372/FGV20210302).

10. N. Takeshima, K. Ozawa, N. Tsuboi, A. K. Hayashi, Y. Morii. Numerical simulations on propane/oxygen detonation in a narrow channel using a detailed chemical mechanism: formation and detailed structure of irregular cells. *Shock Waves*. – 2020. – V. 30, № 1. – P. 809–824. doi: <https://doi.org/10.1007/s00193-020-00978-5>.

11. C. N. Chaumeix, S. Pichon, F. Lafosse, C.-E. Paillard. Role of chemical kinetics on the detonation properties of hydrogen/natural gas/air mixtures. *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2007. – V. 32, № 13. – P. 2216-2226. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2007.04.008>.

12. K. C. Tang-Yuk, X. Mi, J. H. S. Lee, H. D. Ng, R. Deiterding. Transmission of a detonation wave across an inert layer. *Combustion and Flame*. – 2022. – V. 236, February 2022. - Article 111769. doi: [10.1016/j.combustflame.2021.111769](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2021.111769).

13. V. A. Levin, I. S. Manuilovich, V. V. Markov. Formation of Multiheaded Rotating Detonation. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. – 2022. – V. 58, № 5. – P. 577–584. doi: <https://doi.org/10.1134/S0010508222050100>. В. А. Левин, И. С. Мануйлович, В. В. Марков. Формирование многоголовой вращающейся детонации. *Физика горения и взрыва*. – 2022. – Т. 58, № 5. – С. 79-86. doi: [10.15372/FGV20220510](https://doi.org/10.15372/FGV20220510).

14. R. Mével, S. Javoy, K. Coudoro, G. Dupré, C.-E. Paillard. Assessment of H₂-CH₄-air mixtures oxidation kinetic models used in combustion. *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2012. – V. 37, № 1. – P. 698-714. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.09.099>.
15. H. Teng, L. Zhou, P. Yang, Z. Jiang. Numerical investigation of wavelet features in rotating detonations with a two-step induction-reaction model. *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2020. – V. 45, № 7. – P. 4991-5001. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.12.063>.
16. C. Matignon, D. Desbordes, H. N. Presles. Detonabilité de mélanges stoechiométriques méthane-hydrogène-oxygène-azote. *Comptes Rendus. Mécanique*. – 2006. – V. 334, № 4. – P. 238-242. doi: [10.1016/j.crme.2006.02.001](https://doi.org/10.1016/j.crme.2006.02.001).
17. O. Bozier, R. Sorin, F. Virot, D. Desbordes. Detonability of binary H₂/CH₄-Air mixtures. 3rd International Colloquium on Hydrogen Safety, Ajaccio, France, 2009, Paper id 188.
18. W. Rudy, M. Zbikowski, A. Teodorczyk. Detonation in hydrogen-methane-air mixtures in semi confined flat channels. – *Energy* 2016. – V. 116, № 3. P. 1479-1483. doi: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2016.06.001>.
19. L.-Q. Wang, H.-H. Ma, Z.-W. Shen, D.-G. Chen. Experimental study of DDT in hydrogen-methane-air mixtures in a tube filled with square orifice plates. *Process Safety and Environmental Protection*. – 2018. – V. 116, May 2018. – P. 228-234. doi: [10.1016/j.psep.2018.01.017](https://doi.org/10.1016/j.psep.2018.01.017).
20. I. O. Moen, J. W. Funk, S. A. Ward, G. M. Rude, P. A. Thibault. Detonation length scales for fuel-air explosives. *Progress in Astronautics and Aeronautics*. – 1984. – V. 94. – P. 55-79. doi: <https://doi.org/10.2514/5.9781600865695.0055.0079>.
21. C. M. Guirao, R. Knustautas, J. H. Lee, W. Benedick, M. Berman. Hydrogen-air detonations. 19th Symposium (international) on Combustion

Processes. Haifa (Israel), 1982. P. 583-590. doi: [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(82\)80232-4](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(82)80232-4).

22. H. Zhao, R. Zhao, J. Liu, Y. Bao, Y. Lu. Low-temperature detonation characteristics of methane-hydrogen mixtures with different components. *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2025. - V. 126, 9 May 2025. – P. 77-86. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2025.04.073>.

23. H. Zhao, R. Zhao, J. Liu, Y. Bao Influence of equivalence ratio on detonation characteristics of low-temperature premixed hydrogen–oxygen mixtures. *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2025. – V. № 111, 20 March 2025. – P. 251-263. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2025.02.279>.

24. J. Li, J. Pan, C. Jiang, J. Ni, Z. Pan, P. Otchere. Effect of hydrogen addition on the detonation performances of methane/oxygen at different equivalence ratios. *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2019. – V. 44, № 51. – P. 27974-27983. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.09.016>.

25. Y. Hou, X. Liu, X. Lv, L. Chen, X. Yu, X. Yan, J. Yu. The influence of CO₂/N₂/He dilution on CH₄–H₂–2.5O₂ detonation behaviors. *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2024. – V. 79, № 19. – P. 1009-1018. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.07.120>.

26. B. Zhang. Detonation limits in methane-hydrogen-oxygen mixtures: Dominant effect of induction length. *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2019. – V. 44, № 41. - P. 23532-23537. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.07.053>.

27. B. Zhang, C. Wang, X. Shen, L. Yan, B. Yan, Y. Xia. Velocity fluctuation analysis near detonation propagation limits for stoichiometric methane–hydrogen–oxygen mixture. *International Journal of Hydrogen En-*

ergy. – 2016. – V. 41, № 39. – P. 17750-17759. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.08.017>.

28. Y. Cui, C. Wang, D. Chen, C. Qian, B. Qiao. Scaling-effect of explosion in H₂/CH₄/air mixtures. *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2022. – V. 47, № 81. – P. 34704-34714. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.08.040>.

29. I. O. Shamshin, M. V. Kazachenko, S. M. Frolov, V. Ya. Basevich. Deflagration-to-detonation transition in stoichiometric mixtures of the binary methane–hydrogen fuel with air. *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2021. – V. 46, № 68. – P. 34046-34058. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.07.209>.

30. X. Sun, Q. Li, C. Li, S. Lu. Detonation propagation characteristics for CH₄-2H₂-3O₂ mixtures in a tube filled with orifice plates. *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2019. – V. 44, № 14. – P. 7616-7627. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.01.283>.

31. V. A. Subbotin. Two kinds of transverse wave structures in multifront detonation. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. – 1975. – V. 11, № 1. – P. 83–88. doi: <https://doi.org/10.1007/BF00742862>. В. А. Субботин. Два типа структуры поперечных волн в многофронтной детонации. *Физика горения и взрыва*. – 1975. – Т. 11, № 1. – С. 96–102.

32. V. I. Manzhalei. Fine structure of the leading front of a gas detonation. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. – 1977. – V. 13, № 3. – P. 402–404. doi: <https://doi.org/10.1007/BF00740325>. В.И. Манжалей. О тонкой структуре переднего фронта газовой детонации. *Физика горения и взрыва*. – 1977. – Т. 13, № 3. – С. 470-473.

33. Yu. N. Denisov, Ya. K. Troshin. Pulsating and spinning detonation of gas mixtures in tubes. *Doklady Akademii Nauk SSSR (Proceedings of the USSR Academy of Sciences)* (in Russian). – 1959. – V. 125, № 1. – P.

110–113. Ю. Н. Денисов, Я. К. Трошин. Пульсирующая и спиновая детонация газовых смесей в трубах. Доклады Академии Наук СССР. – 1959. – Т. 125, № 1. – С. 110-113.

34. V. I. Manzhalei, V. V. Mitrofanov. The stability of detonation shock waves with a spinning configuration. *Combust Explos Shock Waves*. – 1973, 9, 5, 614–620. doi: <https://doi.org/10.1007/BF00742889>. В. И. Манжалей, В. В. Митрофанов. Об устойчивости детонационных скачков в спиновой конфигурации. *Физика горения и взрыва*. – 1973. – Т. 9, № 5. – С. 703–710

35. Yu. A. Nikolaev, D. V. Zak. Agreement of models of chemical reactions in gases with the second law of thermodynamics. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. – 1988. – V. 24, № 4. – P. 461–464. doi: <https://doi.org/10.1007/BF00750021>. Ю. А. Николаев, Д. В. Зак. Согласование моделей химических реакций в газах со вторым началом термодинамики. *Физика горения и взрыва*. – 1988. - Т. 24. № 4. - С. 87–90.

36. R. F. Strickland-Constable. The burning velocity of gases in relation to the ignition delay. *Third International Symposium on Combustion and Flame, and Explosion Phenomena*. – 1948. – V. 3, № 1. – P. 229-235. doi: [https://doi.org/10.1016/S1062-2896\(49\)80031-6](https://doi.org/10.1016/S1062-2896(49)80031-6).

37. V. P. Glushko (Ed.). *Thermodynamic properties of individual substances*, Izdatel'stvo Akademii Nauk SSSR, Moscow, 1961, Vol. 2 (in Russian). В.П. Глушко (ред). *Термодинамические свойства индивидуальных веществ*. Москва: Изд-во АН СССР, 1962. – Т. 2. – 916 с.

38. R. K. Cheng, A. K. Oppenheim. Autoignition in methane-hydrogen mixtures. *Combustion and Flame*. – 1984. – V. 58, № 2. – P. 125-139. doi: [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(84\)90088-9](https://doi.org/10.1016/0010-2180(84)90088-9).

39. R. A. Strehlow, A. J. Crooker, R. E. Cusey. Detonation initiation behind accelerating shock wave. *Combustion and Flame*. – 1967. – V. 11, № 4. – P. 339-351. doi: [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(67\)90023-5](https://doi.org/10.1016/0010-2180(67)90023-5).

40. A. V. Trotsyuk, P. A. Fomin. Multi-front detonation structure in two-fuel mixtures – numerical modeling. *Journal of Physics: Conference Series* 2020, 1666, 012070, 7 pages, doi:10.1088/1742-6596/1666/1/012070.

41. A. V. Trotsyuk, P. A. Fomin. Modeling of cellular detonation wave structure in stoichiometric dual-fuel mixture of synthesis-gas with oxidizer. *Gorenie i Vzryv (Moskva) - Combustion and Explosion (in Russian, Abstract in English)*). – 2022. –V. 15, № 1. – P. 47–56. doi: 10.30826/CE22150106. А. В. Троцюк, П. А. Фомин. Моделирование ячеистой структуры детонационной волны в стехиометрической двухтопливной смеси синтез-газа с окислителем. *Горение и взрыв*. – 2022. – Т. 15, № 1. – С. 47–56. doi: 10.30826/CE22150106

42. R. I. Soloukhin. Measurement methods and basic results of shock-tube experiments. In: *Proceedings of the 7th Int. Shock Tubes Symposium*. 23-25 June 1969, Toronto, Canada. University of Toronto Press, Toronto and Buffalo, 1970. – P. 662-706. ISBN 0-8020-1729-0.

43. The NASA Computer program CEARUN (Chemical Equilibrium with Applications). Access mode: <https://cearun.grc.nasa.gov/index.html>.

44. R. Porowski, A. Teodorczyk. Cellular structure of detonation wave in hydrogen-methane-air mixtures. *Journal of Power Technologies*. – 2011. – V. 91, № 3. – P. 130–135.

45. E. S. Oran, J. P. Boris. *Numerical Simulation of Reactive Flow*. Second Edition. Cambridge University Press, 2001, 529 p. ISBN 0-521-58175-3 and 9780521581752. Э. Оран, Дж. Борис. Численное моделирование реагирующих потоков. М.: Мир, 1990, 664 с. ISBN 5-03-001460-8.

46. A. V. Trotsyuk, A. A. Vasiliev. Numerical modeling of two-dimensional structure of a rich methane-air mixture detonation. *Modern Science: Researches, Ideas, Results, Technologies*, (In Russian). – 2015. – V. 16, № 1. – P. 178–183. ISSN 2522-9214 (Online), ISSN 2076-6866 (Print). А. В. Троцюк, А. А. Васильев. Численное исследование ячеистой структуры детонации метано-кислородной смеси. *Современная наука. Исследования. Идеи. Результаты. Технологии*. – 2014. – Т. 14, № 1. – С. 139-145. ISSN 2522-9214 (Online), ISSN 2076-6866 (Print).

47. A. V. Trotsyuk, P. A. Fomin. Reduced model of chemical kinetic and two-dimensional structure of detonation wave in rich mixtures of methane with oxidizer. *Journal of Physics: Conference Series* 2019, 1261, 012037, 6 pages. doi:10.1088/1742-6596/1261/1/012037.

48. H. Shimizu, N. Tsuboi, A. K. Hayashi. Study of Detailed Chemical Reaction Model of Hydrogen-Air Detonation. AIAA 2001-0478.

49. S. P. Borisov, A. N. Kudryavtsev, A. A. Shershnev Comparison of detailed chemical models of hydrogen combustion in numerical simulations of detonation. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. – 2021. - V. 57, № 3. – P. 270–284. doi: <https://doi.org/10.1134/S0010508221030023>. С.П. Борисов, А. Н. Кудрявцев, А. А. Шершнеv. Сравнение детальных химических моделей горения водорода при численном моделировании детонации. *Физика горения и взрыва*. – 2021. – Т. 57, № 3. – С. 18–33. doi: 10.15372/FGV20210302.

50. A. V. Trotsyuk Numerical simulation of classical and rotating detonation waves in methane mixtures. *Journal of Physics: Conference Series*, (2017) 894 012097. DOI: 10.1088/1742-6596/894/1/012097.

51. A. V. Trotsyuk. Numerical study of continuously rotating detonation in two-fuel gaseous mixture. *Journal of Physics: Conference Series*

2057 (2021) 012066. IOP Publishing. doi:10.1088/1742-6596/2057/1/012066.

52. F. A. Bykovskii, S. A. Zhdan, E. F. Vedernikov, A. N. Samsonov. Scaling factor in continuous spin detonation of syngas–air mixtures. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. – 2017. – Vol. 53, № 2. – P. 187–198. doi: <https://doi.org/10.1134/S0010508217020095>. Ф. А. Быковский, С. А. Ждан, Е. Ф. Ведерников, А. Н. Самсонов. Масштабный фактор при непрерывной спиновой детонации смесей синтез-газ – воздух. *Физика горения и взрыва*. – 2017. – Т. 53, № 2. – С. 71–83. doi: [10.15372/FGV20170209](https://doi.org/10.15372/FGV20170209).

53. J. M. Austin, J. E. Shepherd. Detonation in hydrocarbon fuel blends. *Combustion and Flame*. – 2003. – V. 132, № 1-2. – P. 73-90. doi: [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(02\)00422-4](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(02)00422-4).

54. V.N. Gamezo, D. Desbordes, E.S. Oran. Formation and Evolution of two-dimensional cellular detonations. *Combustion and Flame*. – 1999. – V. 116, № 1-2. – P. 154-165. doi: [10.1016/S0010-2180\(98\)00031-5](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(98)00031-5).

55. N. Takeshima, K. Ozawa, N. Tsuboi, A. K. Hayashi, Y. Morii. Numerical simulations on propane/oxygen detonation in a narrow channel using a detailed chemical mechanism: formation and detailed structure of irregular cells. *Shock Waves*. – 2020. – V. 30. – P. 809–824. doi: <https://doi.org/10.1007/s00193-020-00978-5>.

56. K. C. Tang-Yuk, X. C. Mi, J. H.S. Lee, H. D. Ng, R. Deiterding. Transmission of a detonation wave across an inert layer. *Combustion and Flame*. – 2022. – V. 236, February 2022. – 111769. doi: [10.1016/j.combustflame.2021.111769](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2021.111769).

57. A. A. Vasil'ev. Detonation properties of the synthesis gas. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. – 2007. – V. 43, №. 6. – P. 703–709. doi: <https://doi.org/10.1007/s10573-007-0095-1>. А. А. Васильев. Детона-

ционные свойства синтез-газа. Физика горения и взрыва. – 2007. Т. 43, № 6. – С. 90–96.

58. P. L. Lu, E. K. Dabora, J. A. Nicholls. The structure of H_2 -CO- O_2 detonations. *Combustion Science and Technology*. – 1969. – V. 1, № 1. – P. 65–74. doi: <https://doi.org/10.1080/00102206908952191>.

59. R. A. Strehlow, A. J. Crooker, R. E. Cusey. Detonation initiation behind accelerating shock wave. *Combustion and Flame*. – 1967. – V. 11, № 4. – P. 339–351. doi: [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(67\)90023-5](https://doi.org/10.1016/0010-2180(67)90023-5).

60. A. A. Vasil'ev. Ignition delay in multifuel mixtures. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, – 2007. – V. 43, № 3. – P. 282-285. doi: <https://doi.org/10.1007/s10573-007-0041-2>. Васильев А. А. Задержка воспламенения в многотопливных смесях. Физика горения и взрыва. – 2007. – Т. 43, № 3. – С. 42–46.

61. A. M. Starik, N. S. Titova, A. S. Sharipov, V. E. Kozlov. Syngas Oxidation Mechanism. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. – 2010. – V. 46, № 5. – P. 491–506. doi: <https://doi.org/10.1007/s10573-010-0065-x>. А. М. Старик, Н. С. Титова, А. С. Шарипов, В. Е. Козлов. О механизме окисления синтез-газа. Физика горения и взрыва. – 2010. – Т. 46, № 5. – P. 3–19.

62. Yu. A. Nikolaev, M. E. Topchiyan. Analysis of equilibrium flows in detonation waves in gases. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. – 1977. – V. 13, № 3. – P. 327–338. Doi: <https://doi.org/10.1007/BF00740309>. Ю. А. Николаев, М. Е. Топчиян. Расчет равновесных течений в детонационных волнах в газах. Физика горения и взрыва. – 1977. – Т. 13, № 3. – С. 393–404.

63. S. K. Godunov, editor. *Chislennoe reshenie mnogomernykh zadach gazovoy dinamiki* [Numerical Solutions of Multi-dimensional Problems of Gas Dynamics]. Moscow, Nauka Publ., 1976, 400 p. Годунов С.К. (ред.).

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

64. S. Yamamoto, H. Daiguji. Higher-order-accurate upwind schemes for solving the compressible Euler and Navier–Stokes equations. *Computers and Fluids*. – 1993. – V. 22, № 2/3. – P. 259-270. doi: [https://doi.org/10.1016/0045-7930\(93\)90058-H](https://doi.org/10.1016/0045-7930(93)90058-H).

65. H. Daiguji, X. Yuan, S. Yamamoto. Stabilization of higher-order high resolution schemes for the compressible Navier-Stokes equation. *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*. – 1997. – V. 7, № 2/3. – P. 250-274. doi:10.1108/09615539710163293.

66. S. R. Chakravarthy, S. Osher. *A new class of high accuracy TVD schemes for hyperbolic conservation laws*. Proceedings of the AIAA 23rd Aerospace Sciences Meeting. Reno, Nevada, 1985. AIAA Paper, 1985. № 85-0363.

67. S.-Y. Lin, Y.-S. Chin. Comparison of higher resolution Euler schemes for aeroacoustic computations. *AIAA Journal*. – 1995. – Vol. 33. – P. 237–245.

68. P. Batten, M. A. Leschziner, U. C. Goldberg. Average-state Jacobians and implicit methods for compressible viscous and turbulent flows. *Journal of Computational Physics*. – 1997. – Vol. 137, № 1. – P. 38–78.

69. F. Coquel, B. Perthame. Relaxation of energy and approximate Riemann Solvers for general pressure laws in fluid dynamics. *SIAM Journal of Numerical Analysis*. – 1998. – V. 35, № 6. – P. 2223-2249.

70. J. W. Shen, X. Zhong. Semi-implicit Runge-Kutta schemes for non-autonomous differential equations in reactive flow computations. Proceedings of the AIAA 27th Fluid Dynamics Conference, New Orleans, LA, June 17-20, 1996. AIAA Paper, 1996. No. 96-1969.

71. A. V. Trotsyuk. Numerical study of continuously rotating detonation in two-fuel gaseous mixture. *Journal of Physics: Conference Series*, 22057 (2021) 012066. [oi:10.1088/1742-6596/2057/1/012066](https://doi.org/10.1088/1742-6596/2057/1/012066).

72. S. A. Zhdan, F. A. Bykovskii. Continuous spin detonation (Novosibirsk : Lavrentyev Institute of Hydrodynamics SB RAS Press), 2013 (in Russian). С. А. Ждан, Ф. А. Быковский. Непрерывная спиновая детонация. Новосибирск : Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 2013.

73. S. A. Zhdan, F. A. Bykovskii, E. F. Vedernikov. Effect of combustor geometry on continuous spin detonation in syngas-air mixtures. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. – 2015. – Vol. 51, №. 6. – P. 688–699. [doi:10.1134/S0010508215060106](https://doi.org/10.1134/S0010508215060106). Ф. А. Быковский, С. А. Ждан, Е. Ф. Ведерников, А. Н. Самсонов. Влияние геометрии камеры на реализацию непрерывной спиновой детонации смесей синтез газ-воздух. *Физика горения и взрыва*. – 2015. – Т. 51, № 6. – С. 72–84.

74. A. V. Trotsyuk, P. A. Fomin. Modeling of an irregular cellular structure of the detonation wave in a two-fuel mixture. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. – 2019. – V. 55, № 4. – P. 384-389. [doi:https://doi.org/10.1134/S0010508219040026](https://doi.org/10.1134/S0010508219040026). А. В. Троцюк, П. А. Фомин Моделирование нерегулярной ячеистой структуры детонационной волны в двухтопливной смеси. *Физика горения и взрыва*. – 2019. – Т. 55, № 4. – С. 15-20.

75. A. V. Trotsyuk. Numerical study of two-dimensional structure of detonation front in two-fuel mixtures. *Journal of Physics: Conference Series* 1359 (2019) 012063. [doi:10.1088/1742-6596/1359/1/012063](https://doi.org/10.1088/1742-6596/1359/1/012063).

76. J. M. Austin, J. E. Shepherd. *Proceedings of the 17th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*, July 25-

30, 1999, Heidelberg, Germany CD Disk ISBN 3-932217-01- 2 Universitat Heidelberg, IWR.

77. A. A. Vasil'ev, V. A. Vasiliev. Bifurcation structures in gas detonation. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. – 2010. – Т. 46, № 2. – С. 196-206. А. А. Васильев, В. А. Васильев, А. В. Троцюк. Бифуркационные структуры газовой детонации. *Физика горения и взрыва*. – 2010. – Т. 46, № 2. – С. 88–100.

78. H.-Yu. Tsai, H.-L. Hung, S.-Y. Wu, Ch.-W. Ku, J.-R. Chen, P. A. Fomin, A. V. Fedorov. Effect of temperature and moisture on the ignition behavior of silane release into air. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. – 2017. – V. 53, № 3. P. 276-282. С. Ю. Цзай, Х.-Л. Хун, С.-И. У, Ч.-В. Ку, Дж.-Р. Чэнь, П. А. Фомин, А. В. Федоров. Влияние температуры и влажности на воспламенение силана при истечении в воздух. *Физика горения и взрыва*. – 2017., – Т. 53, № 3. С. 33–41.

79. D. A. Tropin, A. V. Fedorov, P. A. Fomin. Physical and mathematical modeling of one-dimensional and two-dimensional structures of detonation waves in a silane-air mixture. *AIP (Publishing) Conference Proceedings* 1893, 030142 (2017); doi: 10.1063/1.5007600.

80. P. A. Fomin, A. V. Fedorov, D. A. Tropin, J.-R. Chen. Assessment and control of detonation hazard of silane-containing mixtures. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. – 2017. – V. 90, № 2. – P. 465-479. П. А. Фомин, А. В. Федоров, Д. А. Тропин, Дж.-Р. Чен. Оценка и контроль детонационной опасности силаносодержащих смесей. *Инженерно-Физический Журнал*. – 2017. – Т. 90, № 2. – С. 495–509.

81. А. В. Федоров, Д. А. Тропин, П. А. Фомин, Дж.-Р. Чен. Математическое моделирование детонации в гомогенных и гетерогенных смесях. Новосибирск: Параллель, 2017, 295 с. ISBN: 978-5-98901-192-6.

82. A.V. Fedorov, D.A. Tropin, P.A. Fomin. Comparison of detailed and reduced kinetics mechanisms of silane oxidation in the basis of detonation wave structure problem. AIP (Publishing) Conference Proceedings, 1939, 020012 (2018). doi: 10.1063/1.5027322.

83. A. V. Fedorov, D. A. Tropin, P. A. Fomin. Mathematical modeling of the detonation wave structure in the silane-air mixture. Combustion Science and Technology. – 2018. – V. 190, № 6. – P. 1041-1059. doi: 10.1080/00102202.2018.1425685.

84. P. A. Fomin, D. A. Tropin. Explosion and detonation characteristics of silane- and propylene-based mixtures. AIP Conference Proceedings, 2027, 030058 (2018). doi: 10.1063/1.5065152.

85. Z. Weng, Z. Chen, Q. Xiao, R. Mevel. Characteristics of Detonation Propagating in Silane-Nitrous Oxide-Nitrogen Mixtures. Combustion Science and Technology. – 2023. – V. 196, № 18. – P. 5204-5220. doi: <https://doi.org/10.1080/00102202.2023.2252727>.

86. P. A. Fomin, A. V. Trotsyuk, A. A. Vasil'ev, K. Mitropetros, H. Hieronymus, D. Roekaerts. Model of chemical reaction kinetics for calculating detonation processes in gas and heterogeneous mixtures containing hydrogen peroxide. Combustion Science and Technology. – 2006. – V. 178, № 5. P. 895-919.

87. A. A. Vasil'ev, V. A. Vasiliev. Initiation of multifuel mixtures with bifurcation structures. Combustion, Explosion and Shock Wave. – 2016. – V. 52, № 6. P. 621-630. A. A. Васильев, В. А. Васильев. Иницирование многотопливных смесей с бифуркационными структурами. Физика горения и взрыва. – 2016. – Т. 52, № 6. – С. 3–12. doi 10.15372/FGV20160601.

88. P. A. Fomin, T. Kash, A. V. Trotsyuk, H. Hieronymus. Modeling of film and surface detonation. Internal Flows (Proceedings of The 5th Interna-

tional Symposium on Experimental and Computational Aerothermodynamics of Internal Flows, Gdansk, Poland, 2001, September 4-7), Vol. 2, Piotr Doerffer (Ed.), IFFM Publishers, 2001, pp. 935-943.

89. А. В. Троцюк. Numerical study of the reflection of detonation. *Combustion, Explosion and Shock Wave*. – 1999. – V. 35, № 6. P. 690-697. А. В. Троцюк. Численное отражение детонационных волн от клина. *Физика горения и взрыва*. – 1999. – Т. 35, № 6. – С. 97–107.

90. А. А. Vasil'ev, А. В. Trotsyuk. Experimental investigation and numerical simulation of an expanding multifront detonation wave. *Combustion, Explosion and Shock Wave*. – 2003. – V. 39, № 1. P. 80–90. doi: <https://doi.org/10.1023/A:1022157504636>. А. А. Васильев, А. В. Троцюк. Экспериментальное исследование и численное моделирование расширяющейся многофронтной детонационной волны. *Физика горения и взрыва*. – 2003. – Т. 39, № 1. – С. 92–103.

91. Васильев А. А., Васильев В. А. Влияние концентрации компонентов на характеристики горения и детонации смесей метан-водород-кислород-азот. *Физика горения и взрыва*. 2025. – Т. 61, № 1. – С. 3–12. doi: 10.15372/FGV2023.9379.

92. А. А. Васильев, В. А. Васильев. Об особенностях двухтопливных систем метан-водород-кислород. *Физика горения и взрыва*. 2025. – Т. 61, № 6. – С. 65-73. doi: 10.15372/FGV2024.9508.

93. А. А. Vasil'ev, V. A. Vasiliev. Initiation of two- and three fuel combustible systems based on methane, coal dust, and hydrogen. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. – 2023. – V. 59, № 3. – P. 291-307. doi: 10.1134/S0010508223030048. А. А. Васильев, В. А. Васильев Об особенностях двухтопливных систем метан-водород-кислород. *Физика горения и взрыва*. – 2023. – Т. 59, № 3. – С. 44-60. doi: 10.15372/FGV20230304.

94. A. A. Vasil'ev, V. A. Vasil'ev. Multifuel systems: methane-hydrogen-steam. Combustion, Explosion, and Shock Waves. – 2021. – V. 57, № 1. – P. 14-22. А. А. Васильев, В. А. Васильев. Многотопливные системы: метан-водород-водяной пар. Физика горения и взрыва. - 2021. – Т. 57, № 1. – С. 17-26. doi: 10.15372/FGV20210102.

Научное издание

Троцюк Анатолий Владиславович

Фомин Павел Аркадьевич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРЕГУЛЯРНЫХ И «ТОНКИХ»
ДЕТОНАЦИОННЫХ СТРУКТУР В БИНАРНЫХ
ГАЗОВЫХ СМЕСЯХ**

Издается в авторской редакции

Компьютерная верстка *А. П. Бочарниковой*

Дизайн обложки *Я. А. Лесных*

Изд. лиц. ЛР № 020461 от 04.03.1997.

Подписано в печать 01.04.2026. Формат 60 × 84 1/16.

Усл. печ. л. 10,00. Тираж 500 экз. Заказ 41.

Гигиеническое заключение

№ 54.НК.05.953. П.000147.12.02. от 10.12.2002.

Издательско-полиграфический центр СГУГиТ

630108, Новосибирск, ул. Плахотного, 10.

Отпечатано в издательско-полиграфическом центре СГУГиТ

630108, Новосибирск, ул. Плахотного, 8