

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯЧЕИСТОЙ СТРУКТУРЫ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В СТЕХИОМЕТРИЧЕСКОЙ ДВУХТОПЛИВНОЙ СМЕСИ СИНТЕЗ-ГАЗА С ОКИСЛИТЕЛЕМ\*

А. В. Троцюк<sup>1</sup>, П. А. Фомин<sup>2</sup>

**Аннотация:** Предложена обобщенная двухстадийная модель химической кинетики детонационного горения двухтопливной стехиометрической смеси синтез-газа с окислителем. Модель позволяет рассчитывать тепловой эффект химической реакции, молярную массу и внутреннюю энергию смеси без расчета ее детального химического состава. Разработан алгоритм расчета периода индукции химической реакции в рассматриваемой двухтопливной смеси, основанный на формулах для расчета периода индукции в однотопливных смесях каждого из горючих компонентов. Сделан двумерный численный расчет ячеистой многофронтной структуры детонационной волны (ДВ) в стехиометрической смеси синтез-газа с воздухом при различном соотношении между горючими. Химические превращения описывались предложенной кинетической моделью. Полученный размер детонационной ячейки, а также качественная структура ДВ (в том числе ее перестройка от регулярной к нерегулярной при увеличении концентрации оксида углерода) хорошо соответствуют эксперименту.

**Ключевые слова:** двухтопливная смесь; синтез-газ; модель кинетики; детонация; ячейка

**DOI:** 10.30826/CE22150106

## Литература

1. Быковский Ф. А., Ждан С. А., Ведерников Е. Ф., Самсонов А. Н. Масштабный фактор при непрерывной спиновой детонации смесей синтез-газ–воздух // Физика горения и взрыва, 2017. Т. 53. No. 2. С. 71–83. doi: 10.15372/FGV20170209.
2. Austin J. M., Shepherd J. E. Detonation in hydrocarbon fuel blends // Combust. Flame, 2003. Vol. 132. No. 1-2. P. 73–90. doi: 10.1016/S0010-2180(02)00422-4.
3. Gamezo V. N., Desbordes D., Oran E. S. Formation and evolution of two-dimensional cellular detonations // Combust. Flame, 1999. Vol. 116. No. 1-2. P. 154–165. doi: 10.1016/S0010-2180(98)00031-5.
4. Takeshima N., Ozawa K., Tsuboi N., Hayashi A. K., Morii Y. 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. Vol. 30. P. 809–824. doi: 10.1007/s00193-020-00978-5.
5. Tang-Yuk K. C., Mi X. C., Lee J. H. S., Ng H. D., Deiterding R. Transmission of a detonation wave across an inert layer // Combust. Flame, 2022. Vol. 236. Article 111769. doi: 10.1016/j.combustflame.2021.111769.
6. Fomin P. A., Trotsyuk A. V., Vasil'ev A. A. Approximate model of chemical reaction kinetics for detonation processes in mixture of CH<sub>4</sub> with air // Combust. Sci. Technol., 2014. Vol. 186. No. 10-11. P. 1716–1735.
7. Николаев Ю. А., Зак Д. В. Согласование моделей химических реакций в газах со вторым началом термодинамики // Физика горения и взрыва, 1988. Т. 24. № 4. С. 87–90.
8. Strickland-Constable R. F. The burning velocity of gases in relation to the ignition delay // 3rd Symposium (International) on Combustion and Flame, and Explosion Phenomena, 1949. Vol. 33. No. 1. P. 229–235.
9. Николаев Ю. А., Васильев А. А., Ульяницкий В. Ю. Газовая детонация и ее применение в технике и технологиях (обзор) // Физика горения и взрыва, 2003. Т. 39. No. 4. С. 22–54.
10. Васильев А. А. Детонационные свойства синтез-газа // Физика горения и взрыва, 2007. Т. 43. № 6. С. 90–96.
11. Lu P. L., Dabora E. K., Nicholls J. A. The structure of H<sub>2</sub>–CO–O<sub>2</sub> detonations // Combust. Sci. Technol., 1969. Vol. 1. No. 1. P. 65–74. doi: 10.1080/00102206908952191.
12. Strehlow R. A., Crooker A. J., Cusey R. E. Detonation initiation behind accelerating shock wave // Combust. Flame, 1967. Vol. 11. No. 4. P. 339–351. doi: 10.1016/0010-2180(67)90023-5.
13. Guirao C. M., Knustautas R., Lee J. H., Benedick W., Berman M. Hydrogen–air detonations // 19th Symposium (International) on Combustion Processes. — Haifa, Israel, 1982. P. 583–590.
14. Васильев А. А. Задержка воспламенения в многотопливных смесях // Физика горения и взрыва, 2007. Т. 43. № 3. С. 42–46.

\* Данное исследование поддержано грантом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2020-806 от 29.09.2020). Вычисления проведены с использованием комплекса MVS-10Q в МСЦ РАН, Москва.

<sup>1</sup> Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук, trotsyuk@hydro.nsc.ru

<sup>2</sup> Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук, pavel\_fomin\_new@mail.ru

15. Старик А. М., Титова Н. С., Шарипов А. С., Козлов В. Е. О механизме окисления синтез-газа // Физика горения и взрыва, 2010. Т. 46. № 5. С. 3–19.
16. Николаев Ю. А., Топчиян М. Е. Расчет равновесных течений в детонационных волнах в газах // Физика горения и взрыва, 1977. Т. 13. № 3. С. 393–404.
17. The NASA Computer program CEARUN (Chemical Equilibrium with Applications). <https://cearun.grc.nasa.gov/index.html>.
18. Троцюк А. В. Численное моделирование структуры двумерной газовой детонации смеси  $H_2-O_2-Ar$  // Физика горения и взрыва, 1999. Т. 35. № 5. С. 93–103.
19. Численное решение многомерных задач газовой динамики / Под ред. С. К. Годунова. — М.: Наука, 1976. 400 с.
20. Yamamoto S., Daiguji H. Higher-order-accurate upwind schemes for solving the compressible Euler and Navier–Stokes equations // Comput. Fluids, 1993. Vol. 22. No. 2/3. P. 259–270. doi: 10.1016/0045-7930(93)90058-H.
21. Daiguji H., Yuan X., Yamamoto S. Stabilization of higher-order high resolution schemes for the compressible Navier–Stokes equation // Int. J. Numer. Method. H., 1997. Vol. 7. No. 2/3. P. 250–274. doi: 10.1108/09615539710163293.
22. Chakravarthy S. R., Osher S. A new class of high accuracy TVD schemes for hyperbolic conservation laws. AIAA Paper No. 85-0363, 1985.
23. Lin S.-Y., Chin Y.-S. Comparison of higher resolution Euler schemes for aeroacoustic computations // AIAA J., 1995. Vol. 33. P. 237–245.
24. Batten P., Leschziner M. A., Goldberg U. C. Average-state Jacobians and implicit methods for compressible viscous and turbulent flows // J. Comput. Phys., 1997. Vol. 137. No. 1. P. 38–78.
25. Coquel F., Perthame B. Relaxation of energy and approximate Riemann solvers for general pressure laws in fluid dynamics // SIAM J. Numer. Anal., 1998. Vol. 35. No. 6. P. 2223–2249.
26. Shen J. W., Zhong X. Semi-implicit Runge–Kutta schemes for non-autonomous differential equations in reactive flow computations. AIAA Paper No. 96-1969, 1996.

Поступила в редакцию 27.12.2021