



# ТРЕХМЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕПРЕРЫВНОЙ СПИНОВОЙ ДЕТОНАЦИИ СМЕСИ СИНТЕЗ-ГАЗ – ВОЗДУХ В КОЛЬЦЕВОЙ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ КАМЕРЕ СГОРАНИЯ

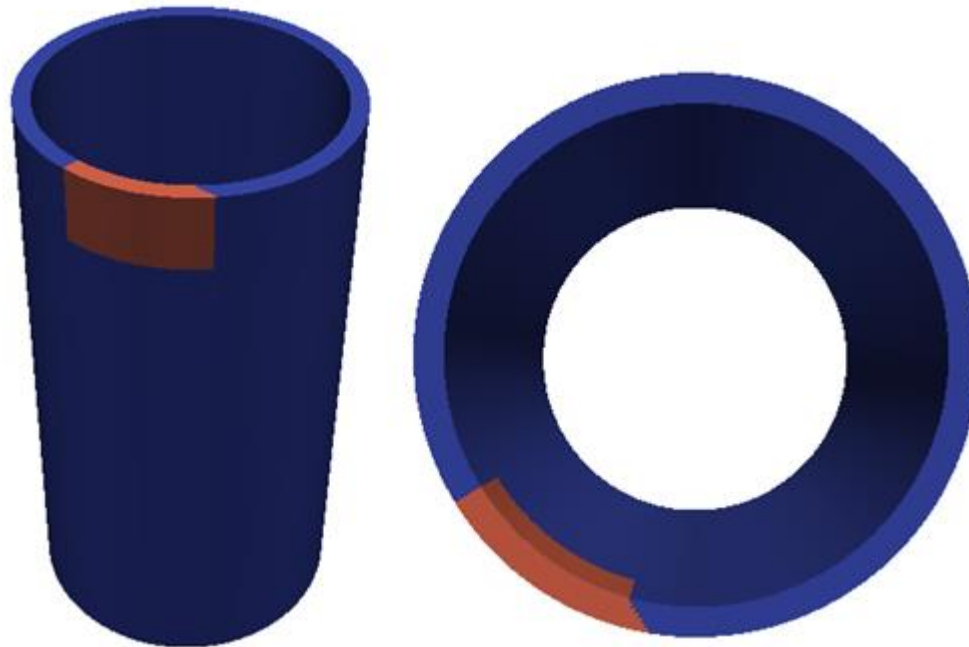
Симонов Е.В., Рыбников А.И., Гурин А.М., Трилис А.В., Самсонов А.Н.

Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН

Совместный семинар "[Высокопроизводительные вычисления](#)" (ССКЦ, НГУ).  
Новосибирск, 7 апреля 2022.

# Математическая модель

Область решения задачи



Идеально перемешанная ТВС подается в КС с удельным расходом  $g_{in}$  через систему микросопел Лавалья, равномерно распределенных по верхнему торцу.

# Математическая модель

## Основные уравнения



$$\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \nabla p = 0$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} (E + p)) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho I}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} I) = F_I$$

$$\frac{\partial \rho \mu}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \mu) = F_\mu$$

инд стадия ( $0 < I \leq 1$ ,  $F_I = -\frac{1}{\tau_{ind}}$ ,  $F_\mu = 0$ )

стадия хим превр ( $I = 0$ ,  $F_I = 0$ ,  $F_\mu \neq 0$ )

$$F_\mu = \frac{4K_p \rho^2}{\mu} \left(1 - \frac{\mu}{\mu_{max}}\right)^2 - 4K_r K_p \rho \left(\frac{\mu}{\mu_{min}} - 1\right) \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{\beta}{2}} \left(1 - \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right)\right)^\beta \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right) \quad (7)$$

$$U_{th} = \frac{RT}{\mu} A(\mu, T), \quad U_{ch} = E_d \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{min}}\right) \quad (8)$$

$$A(\mu, T) = \frac{3}{4} \left(\frac{\mu}{\mu_a} + 1\right) + \frac{3}{2} \left(\frac{\mu}{\mu_a} - 1\right) \frac{\theta/T}{\exp(\theta/T) - 1}$$

$$\tau_{ind} = \frac{A_\Sigma}{[O_2]} \exp\left(\frac{E_\Sigma}{RT}\right) \quad (2)$$

$$A_\Sigma = A_{H_2}^{v_{H_2}/(v_{H_2}+v_{CO})} A_{CO}^{v_{CO}/(v_{H_2}+v_{CO})} \quad (3)$$

$$E_\Sigma = (E_{H_2} v_{H_2} + E_{CO} v_{CO}) / (v_{H_2} + v_{CO})$$

$$\tau_{H_2} = \frac{A_{H_2}}{[O_2]} \exp\left(\frac{E_{H_2}}{RT}\right), \quad \tau_{CO} = \frac{A_{CO}}{[O_2]} \exp\left(\frac{E_{CO}}{RT}\right), \quad (4)$$

где  $A_{H_2} = 5.38 \cdot 10^{-8}$  моль·с/м<sup>3</sup>,  $E_{H_2} = 71803.62$  Дж/моль,

$A_{CO} = 1.38 \cdot 10^{-8}$  моль·с/м<sup>3</sup>,  $E_{CO} = 125531$  Дж/моль

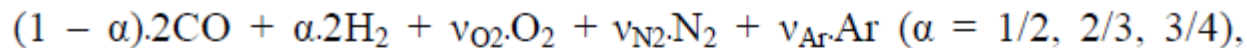
$$p = \rho RT / \mu, \quad U = U_{th} + U_{ch} \quad (5)$$

$$U_{th} = \frac{p}{(\gamma - 1)\rho}, \quad U_{ch} = \text{const} \quad (6)$$

# Математическая модель

## Константы модели

Для трех вариантов стехиометрической смеси синтез-газа с воздухом:



рассматриваемых в дальнейшем, значения констант следующие:

$\mu_{\text{H}_2} = 2 \text{ кг/кмоль}$ ,  $\mu_{\text{O}_2} = 32 \text{ кг/кмоль}$ ,  $\mu_{\text{N}_2} = 28 \text{ кг/кмоль}$ ,  $\mu_{\text{Ar}} = 40 \text{ кг/кмоль}$ ,  $\nu_{\text{CO}} = 1 - \alpha$ ,  $\nu_{\text{H}_2} = \alpha$ ,  $\nu_{\text{O}_2} = 1$ ,  $\nu_{\text{N}_2} = 3.7275$ ,  $\nu_{\text{Ar}} = 0.0445$ ,  $R = 8.3144 \cdot 10^3 \text{ Дж/(кмоль} \cdot \text{К)}$ ,  $K_+ = 6 \cdot 10^8 \text{ с}^6 / (\text{кмоль}^2 \cdot \text{с})$ ,  $\beta = 1.5$ ,  $\theta = 3500 \text{ К}$ ;  $\alpha = 1/2$ :  $E_d = 118.257 \text{ ккал/моль}$ ,  $K_- = 47852 \text{ кмоль/м}^3$ ,  $\mu_{\min} = 19.169 \text{ кг/кмоль}$ ,  $\mu_{\max} = 29.132 \text{ кг/кмоль}$ ,  $\mu_a = 12.456 \text{ кг/кмоль}$ ;  $\alpha = 2/3$ :  $E_d = 112.878 \text{ ккал/моль}$ ,  $K_- = 12502 \text{ кмоль/м}^3$ ,  $\mu_{\min} = 17.515 \text{ кг/кмоль}$ ,  $\mu_{\max} = 27.63 \text{ кг/кмоль}$ ,  $\mu_a = 11.814 \text{ кг/кмоль}$ ;  $\alpha = 3/4$ :  $E_d = 111.96 \text{ ккал/моль}$ ,  $K_- = 8573 \text{ кмоль/м}^3$ ,  $\mu_{\min} = 16.733 \text{ кг/кмоль}$ ,  $\mu_{\max} = 26.88 \text{ кг/кмоль}$ ,  $\mu_a = 11.493 \text{ кг/кмоль}$ .

# Математическая модель

## Граничные условия и начальные данные



**Граничные условия.** На входе в КС (верхний торец) происходило втекание ТВС с исходными параметрами торможения  $p^*$ ,  $T^*$  через систему микросопел Лаваля суммарной площадью  $S^*/S_\Delta$  относительно площади  $S_\Delta$  поперечного сечения КС. На выходе из КС происходило истечение продуктов детонации в пространство с противодавлением  $p_a$ . На боковых цилиндрических стенках КС задавалось условие непротекания.

**Начальные данные.** В качестве начальных данных в КС использовалась неподвижная стехиометрическая ТВС одного из трех стехиометрических составов ( $\alpha = 1/2, 2/3, 3/4$ ),.

Система уравнений (1–8), дополненная граничными условиями и начальными данными, замкнута и полностью определяет нестационарное движение реагирующей смеси синтез-газ - воздух в рассматриваемой КС.



# Метод решения

## Программный пакет OpenFoam

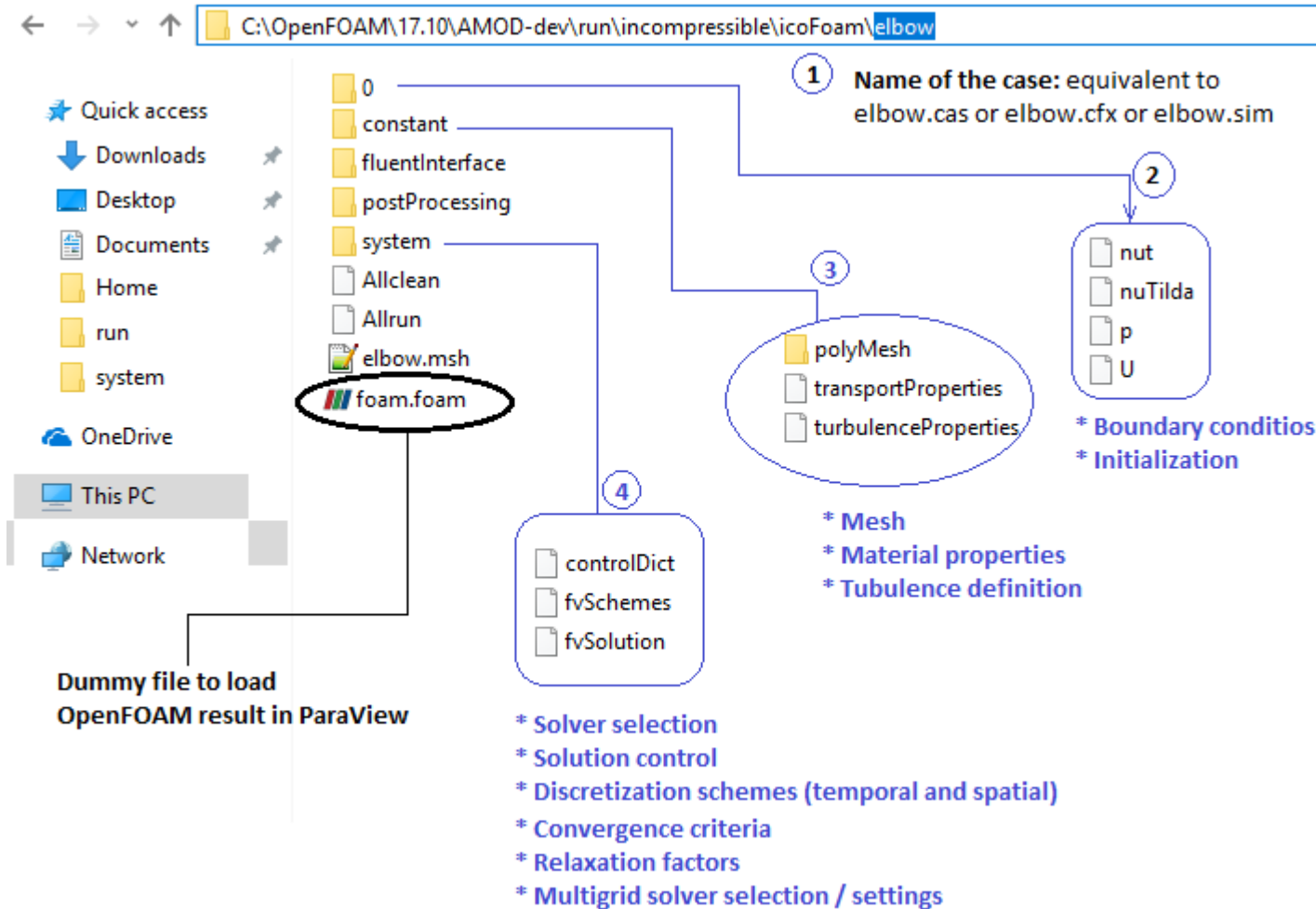
**OpenFOAM** - открытая (GPL) платформа для численного моделирования - в первую очередь для моделирования, связанного с решением уравнений в частных производных методом конечных объемов, и в самую первую очередь - для решения задач механики сплошных сред.

**Структура OpenFOAM:** библиотека классов для многих операций, библиотека программ («солверов»), четкое разделение между «солвером» и «кейсом» («case» – конкретный вариант расчета: область решения, начальные и граничные данные, и др. параметры), визуализация (ParaView и пр.)



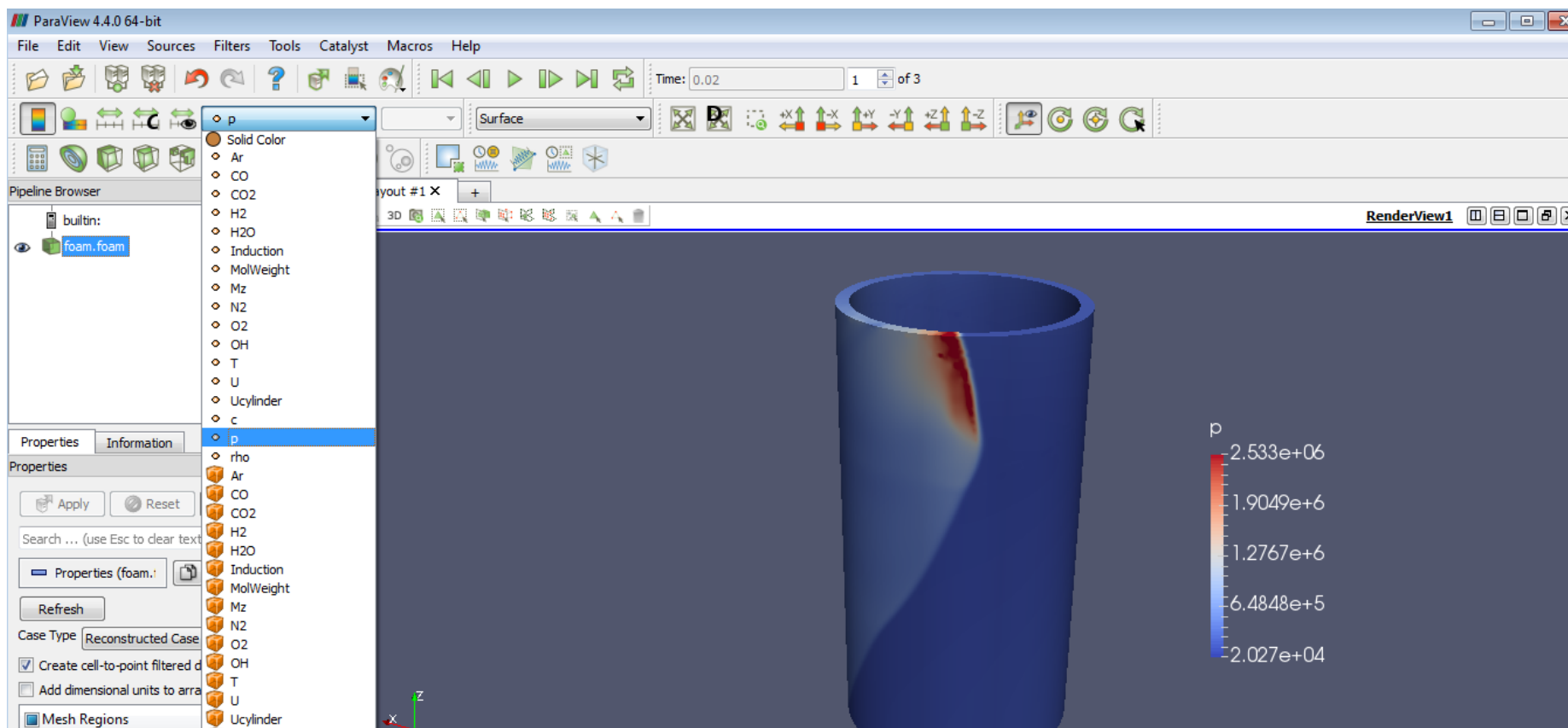
# Метод решения

## Как выглядит Case в OpenFoam



# Метод решения

Как выглядит решение в ParaView







# Метод решения

## Расчетный метод и сетка

Численный метод – схема Годунова 1-го порядка.

Размер ячейки – 2 мм.

Общее число ячеек –  $400 \times 250 \times 7 = 700000$ .

Стандартное время одного расчета на 2-х узлах ( $32 \times 2 = 64$  процессора) = 1 день. За 1 расчет = примерно 10 оборотов волны.

При увеличении числа узлов время расчета падает нелинейно.

Макс. используемое число узлов = 4.

# Результаты расчетов

## Верификация на задержках воспламенения



T, K	1000	1200	1400	1600	1800
$\tau_{\text{ind}} (2-4)$ , мс	2.7	0.45	0.13	0.05	0.025
$\tau_{\text{ind}} [K13]$ , мс	2.5	0.08	0.03	0.02	0.014
Отличие	x1.08	x5.625	x4.33	x2.5	x1.78

**A. Kéromnès, et al.** An experimental and detailed chemical kinetic modeling study of hydrogen and syngas mixture oxidation at elevated pressures

// Combust. Flame 160 (2013) 995–1011. [K13]

# Результаты расчетов

## Верификация на расчетах одномерной детонации и параметров Чемпена-Жуге

Таблица 2.1. Параметры Чемпена-жуге для горючего  $\text{CO} + \text{H}_2$

	$D_{\text{ЧЖ}}, \text{ м/с}$	$p_{\text{ЧЖ}}, \text{ атм}$	$T_{\text{ЧЖ}}, \text{ К}$	$\rho_{\text{ЧЖ}}, \text{ кг/м}^3$	$\mu_{\text{ЧЖ}}, \text{ г/моль}$
Расчет	1800	16.36	2909	1.92	28.07
[Прууэл]	1791.68	15.42	2875.31	1.84	28.15
Отличие	+0.5%	+6%	+1.2%	+4.3%	-0.3%

Таблица 2.2. Параметры Чемпена-жуге для горючего  $\text{CO} + 2\text{H}_2$

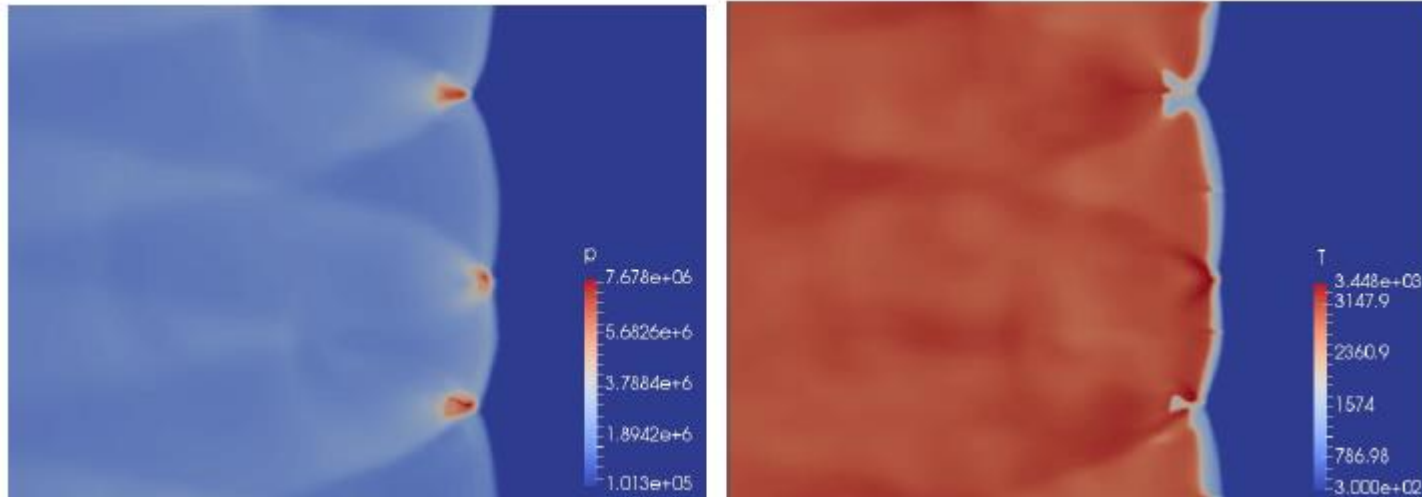
	$D_{\text{ЧЖ}}, \text{ м/с}$	$p_{\text{ЧЖ}}, \text{ атм}$	$T_{\text{ЧЖ}}, \text{ К}$	$\rho_{\text{ЧЖ}}, \text{ кг/м}^3$	$\mu_{\text{ЧЖ}}, \text{ г/моль}$
Расчет	1868	16.39	2983	1.8	26.81
[Прууэл]	1843.07	15.45	2891.95	1.74	26.73
Отличие	+1.4%	+6%	+3.1%	+3.4%	+0.3%

Таблица 2.3. Параметры Чемпена-жуге для горючего  $\text{CO} + 3\text{H}_2$

	$D_{\text{ЧЖ}}, \text{ м/с}$	$p_{\text{ЧЖ}}, \text{ атм}$	$T_{\text{ЧЖ}}, \text{ К}$	$\rho_{\text{ЧЖ}}, \text{ кг/м}^3$	$\mu_{\text{ЧЖ}}, \text{ г/моль}$
Расчет	1896	16.43	2997	1.75	26.13
[Прууэл]	1871.14	15.48	2903.02	1.69	26.01
Отличие	+1.3%	+6.1%	+3.2%	+3.6%	+0.5%

# Результаты расчетов

## Верификация на расчетах размеров ячеек детонации

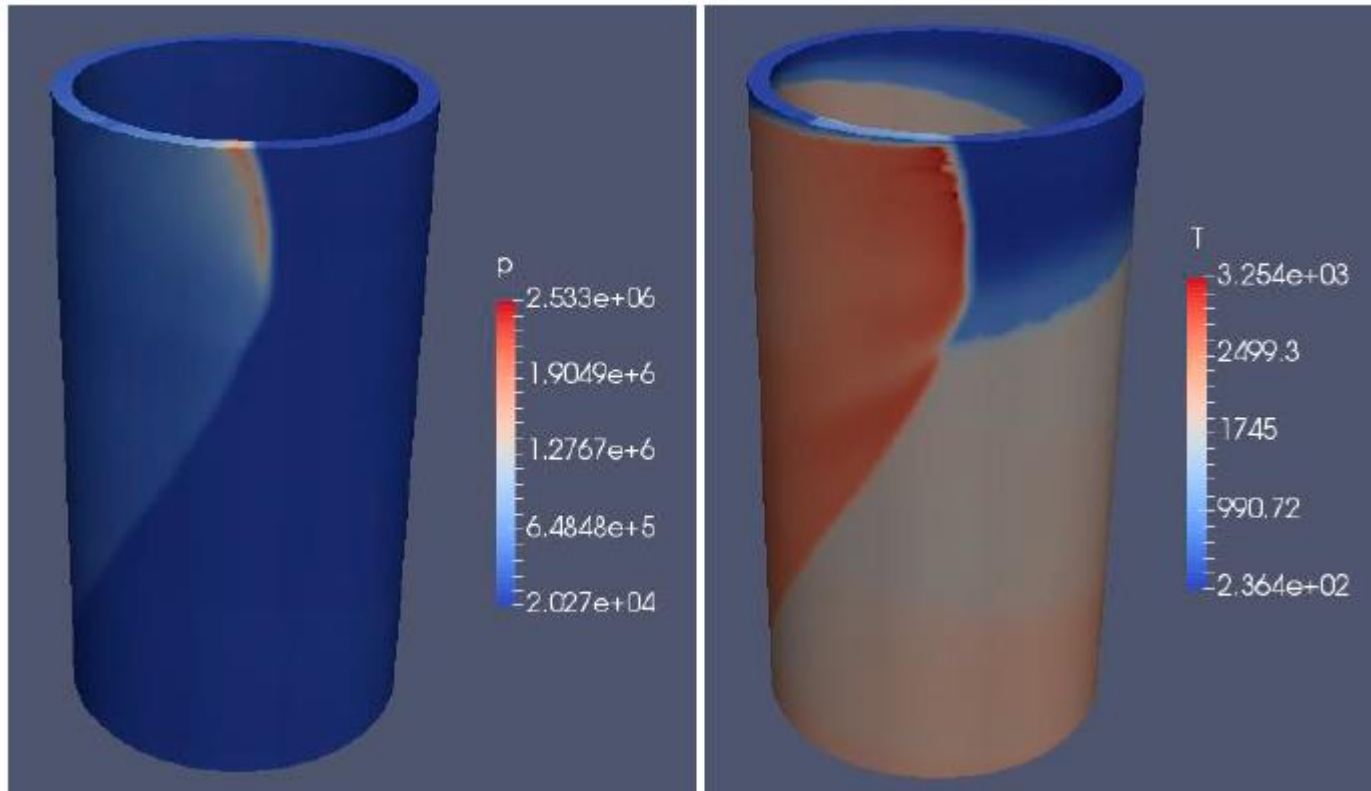


Распределения давления и температуры в окрестности ДВ для стехиометрической ТВС  $\text{CO} + 2\text{H}_2 + \text{воздух}$  для  $h = 0.125$  мм.

На всей высоте области (4 см) просматривается 3 детонационные ячейки, поперечный размер ячейки  $a \approx 1.3$  см, что качественно соответствует экспериментальным данным.

# Результаты расчетов

Периодическое решение (3D давление и температура)



$D_{ch} = 30.6 \text{ см}$ ,  $L = 57 \text{ см}$ ,  $\Delta = 1.65 \text{ см}$ ,  $G = 130 \text{ кг / (с} \cdot \text{м}^2)$ ,  $D = 1590 \text{ м/с}$ ,  $f \approx 1.75 \text{ кГц}$ ,  $h \approx 19 \text{ см}$

**Смесь CO + 2H<sub>2</sub> + Air**

# Результаты расчетов

## Периодическое решение (давление в точке)



Зависимость давления от времени

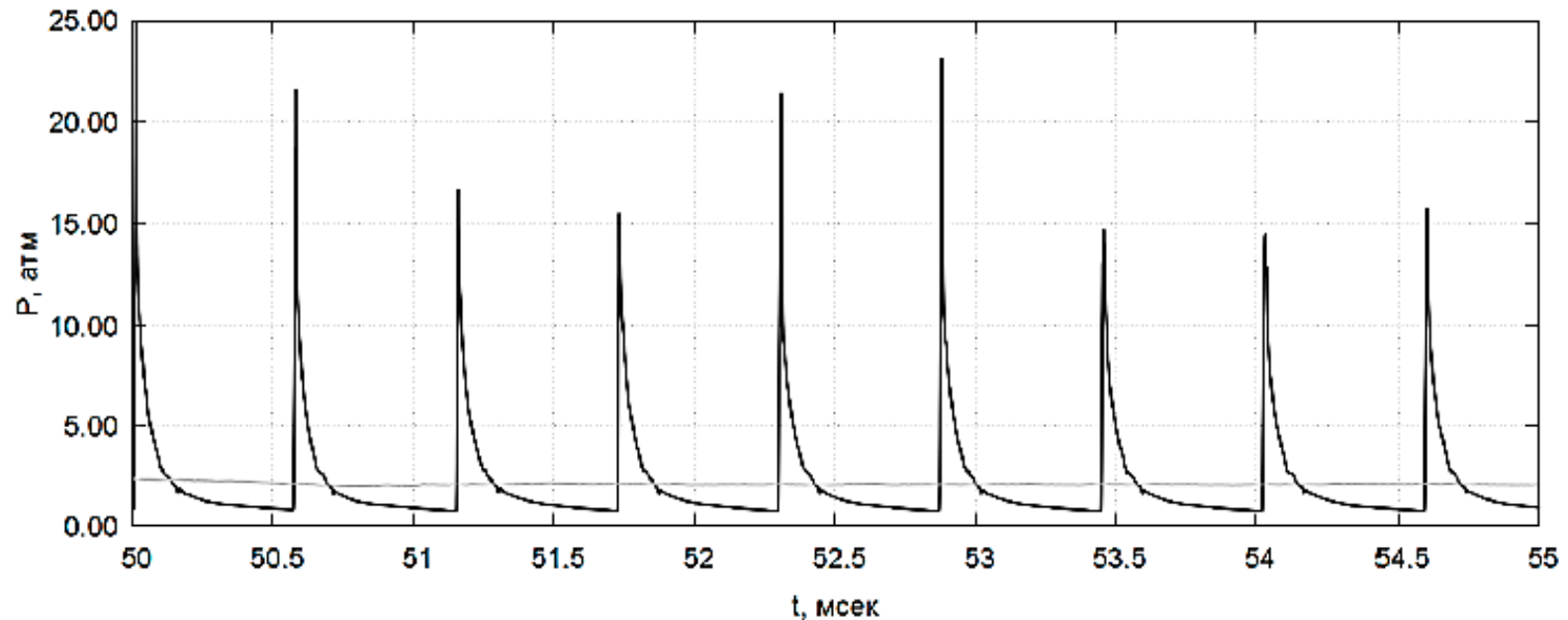
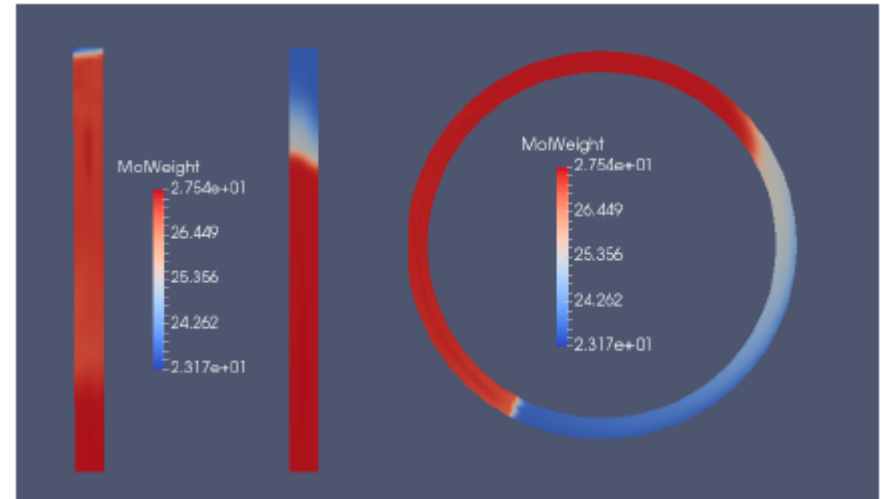
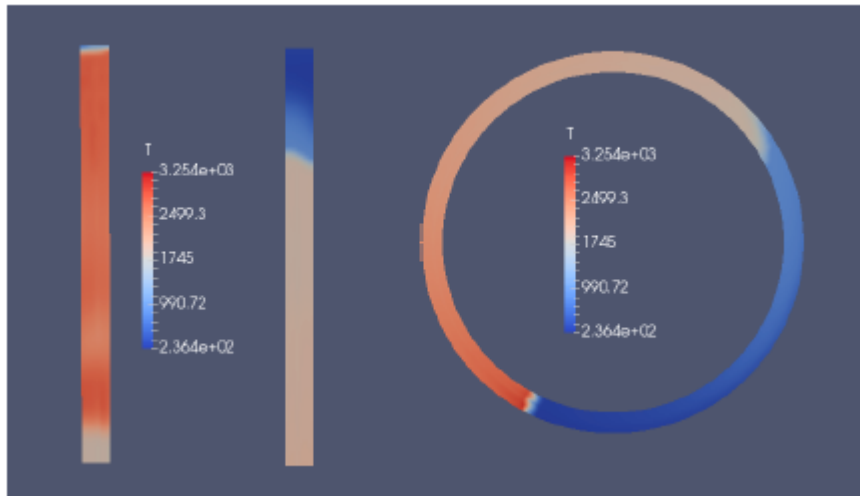


Рис.  $[P(t)]$  Зависимость давления  $P$  (атм) от времени  $t$  (мс) в фиксированной точке КС ( $R = 144.75$  мм,  $Z = 570$  мм).

# Результаты расчетов

Существенная трехмерность решения



Температура и молярная масса в вертикальных и горизонтальных сечениях камеры сгорания

Смесь  $\text{CO} + 2\text{H}_2 + \text{Air}$

# Результаты расчетов

## Результаты расчетов

Расчетные параметры НСД ТВС синтез-газ – воздух в КС

$P^*$ , атм	$g_{in}$ , кг/(с·м <sup>2</sup> )	$\langle P \rangle$ , атм	$h_D$ , см	$D$ , км/с	$f$ , кГц	$I$
$CO + 2H_2 + \text{воздух}$						
3.06	130	2.14	$17 \pm 1$	1.57	$1.76 \pm 0.02$	1850
3.61	150	2.38		1.6		2300
4.17	170	2.69		1.62		2750

Расчетные параметры для смеси  $CO + 2H_2 + \text{Air}$





# Выводы

1. В рамках трехмерной нестационарной постановки сформулирована замкнутая математическая модель НСД для смеси синтез-газ – воздух в кольцевой цилиндрической КС типа ЖРД с уравнением химической кинетики Фомина-Николаева.
2. Разработан численный алгоритм решения поставленной задачи. Проведена верификация модели и численного алгоритма. Показано, что построенная модель позволяет удовлетворительно вычислять задержки воспламенения, параметры Чемпена-Жуге одномерной детонации и размеры ячеек детонации.
3. Для геометрических параметров КС и удельных расходов ТВС  $100 \div 260 \text{ кг}/(\text{с}\cdot\text{м}^2)$  для трех указанных стехиометрических смесей синтез-газа с воздухом впервые проведено численное моделирование и получены устойчивые одноволновые режимы НСД, проанализирована трехмерная структура ПДВ, проведено сравнение с экспериментами.
4. Наблюдается явная трехмерность детонационного процесса, выражающаяся в неравномерности натекания исходной смеси из входного торца КС – смесь быстрее вытесняет продукты детонации у внешней стенки КС, чем у внутренней.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Новосибирской области в рамках проекта № 19-41-543009.



Спасибо за внимание!