

УДК 533.27: 534.222.2

УПРАВЛЕНИЕ ДЕТОНАЦИОННЫМ ГОРЕНИЕМ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ ПОСРЕДСТВОМ ВНЕСЕНИЯ АРГОНА И ОЗОНА

© 2021 г. Академик РАН В. А. Левин^{1,*}, Т. А. Журавская^{1,**}

Поступило 06.08.2021 г.

После доработки 06.08.2021 г.

Принято к публикации 20.10.2021 г.

Численно исследовано влияние добавок аргона и озона в стехиометрическую водородно-воздушную смесь на параметры волны детонации с целью снижения скорости распространения волны и температуры продуктов горения без существенного увеличения детонационной ячейки, являющейся фундаментальной характеристикой детонационной способности смеси. Установлено, что молярные доли вносимых добавок могут быть подобраны так, что размер ячейки волны детонации в полученной смеси будет близок к среднему размеру ячейки в чистой смеси, при этом скорость волны и температура продуктов детонации будут существенно снижены. Обнаружено, что детонационная волна в смеси с добавками в концентрациях, не допускающих значимого увеличения размера ячейки, более устойчива к возмущениям, вызванным расположенными в канале препятствиями, чем в чистой смеси. Исследование проведено с использованием схемы второго порядка на основе метода Годунова; для моделирования химических реакций использовался детальный кинетический механизм.

Ключевые слова: детонационная волна, стехиометрическая водородно-воздушная смесь, ячеистая структура, аргон, озон

DOI: 10.31857/S2686740021060110

Изменение состава горючей газовой смеси за счет внесения в смесь различных добавок или предварительного преобразования ее компонентов является одним из основных способов управления детонацией. Так, в [1, 2] численно установлена возможность предотвращения гашения детонационного горения стехиометрической водородно-воздушной смеси в каналах с препятствиями посредством предварительной частичной диссоциации молекулярного водорода и кислорода на атомы, приводящей к существенному уменьшению размера детонационной ячейки и незначительному увеличению скорости распространения волны [1–4]. Обнаруженное в численном исследовании измельчение ячеистой структуры без значимого изменения скорости волны в результате указанной предварительной диссоциации подтверждается результатами экспериментов по распространению детонации в водородно-кислородной сме-

си с добавлением озона, который быстро разлагается за лидирующей ударной волной с образованием атомарного кислорода [5]. Изучение структуры плоской одномерной стационарной волны детонации (структуры детонации Зельдовича–Неймана–Дёринга (ЗНД-структуры)) показало, что как предварительная частичная диссоциация горючего и окислителя в водородно-воздушной смеси [2], так и добавление в горючую смесь озона [5] приводят к значительному уменьшению протяженности зоны индукции, при этом скорость волны детонации Чепмена–Жуге и параметры газа за ней меняются незначительно. Однако использование детонационного горения в различных энергетических установках требует решения сложной проблемы охлаждения стенок детонационной камеры. Упростить задачу возможно снижением температуры продуктов горения. Простым способом понижения температуры за волной является внесение в горючую смесь аргона, приводящее при этом к существенному росту детонационной ячейки. В [6] в рамках ЗНД-модели детонации было рассмотрено влияние на структуру волны добавления в горючую смесь инертных разбавителей и промоторов (озона и перекиси водорода) с целью уменьшения постде-

¹ Научно-исследовательский институт механики Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*E-mail: levin@imec.msu.ru

**E-mail: zhuravskaya@imec.msu.ru

тонационной температуры и предотвращения увеличения зоны индукции.

В данной работе с использованием детальной кинетики химического взаимодействия численно исследуется влияние добавок озона и аргона в стехиометрическую водородно-воздушную смесь на параметры волны детонации с целью снижения скорости распространения волны и температуры продуктов горения без существенного увеличения размера детонационной ячейки, являющегося важным параметром, определяющим ряд критических условий и, как следствие, поведение волны детонации.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается распространение детонационной волны в покоящейся при нормальных условиях ($p_0 = 1$ атм, $T_0 = 298$ К) газовой смеси в полубесконечном плоском канале шириной L ($L = 1$ см). Для инициирования детонации используется мгновенный однородный сверхкритический (достаточный для прямого инициирования детонации) подвод энергии в области, имеющей форму тонкого слоя, около закрытого торца канала. Изучается детонационное горение как чистой стехиометрической водородно-воздушной смеси, которая моделируется как смесь газов H_2 , O_2 и N_2 в молярном соотношении 42 : 21 : 79 соответственно, так и в смеси с добавками озона O_3 и аргона Ar.

Система уравнений, описывающих плоское двумерное нестационарное течение невязкой многокомпонентной реагирующей газовой смеси, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho vu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2 + p)}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho(u^2 + v^2)/2 + \rho h - p)}{\partial t} + \\ + \frac{\partial(\rho u((u^2 + v^2)/2 + h))}{\partial x} + \\ + \frac{\partial(\rho v((u^2 + v^2)/2 + h))}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho n_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u n_i)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v n_i)}{\partial y} &= \rho \omega_i. \end{aligned}$$

Здесь x и y – продольная и поперечная декартовы координаты; u и v – соответствующие компоненты скорости; t – время; ρ , p и h – плотность, давление и удельная энтальпия смеси; n_i и ω_i – удель-

ные молярная концентрация и скорость образования i -го компонента смеси. Уравнения состояния горючей смеси суть

$$p = \rho R_0 T \sum_i n_i, \quad h = \sum_i n_i h_i(T).$$

Здесь T – температура, R_0 – универсальная газовая постоянная. Зависимости парциальных энтальпий от температуры $h_i(T)$ определяются по приведенным энергиям Гиббса соответствующих компонентов смеси [7]. Для описания химического взаимодействия используется современный детальный кинетический механизм окисления водорода, предложенный в [8].

Для решения уравнений газовой динамики использовалась явная разностная схема второго порядка на основе схемы С.К. Годунова, второй порядок точности по времени в которой достигается с помощью алгоритма типа предиктор-корректор [9]. Расчет проведен на сетке с шагом разбиения $\Delta = 5$ мкм, обеспечивающим корректное разрешение структуры волны детонации. Для численного моделирования использовался оригинальный программный модуль, в котором реализовано гибридное распараллеливание расчетов MPI/OpenMP. Исследование выполнено с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [10].

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Начальный подвод энергии инициирует в канале плоскую детонационную волну, фронт которой со временем теряет устойчивость, возникают поперечные волны, в результате формируется самоподдерживающаяся детонационная волна с ячеистой структурой.

В случае чистой водородно-воздушной смеси получаемая в расчетах волна детонации имеет нерегулярную ячеистую структуру, что соответствует наблюдаемому в эксперименте для разбавленных азотом смесей [11]. Анализ полученной ячеистой структуры волны детонации показал, что максимальное значение относительного отклонения поперечного размера ячейки от среднего составляет более 60%. Численный аналог следа, оставляемого распространяющейся в плоском канале детонационной волной на расположенной вдоль стенки закопченной пластине, представлен на рис. 1а.

Моделирование распространения детонации в смеси с добавлением озона показало, что ячеистая детонационная структура становится существенно более мелкой, при этом скорость волны изменяется незначительно, что согласуется с результатами экспериментов [5]. Так, в случае $x_{O_3} = 1\%$

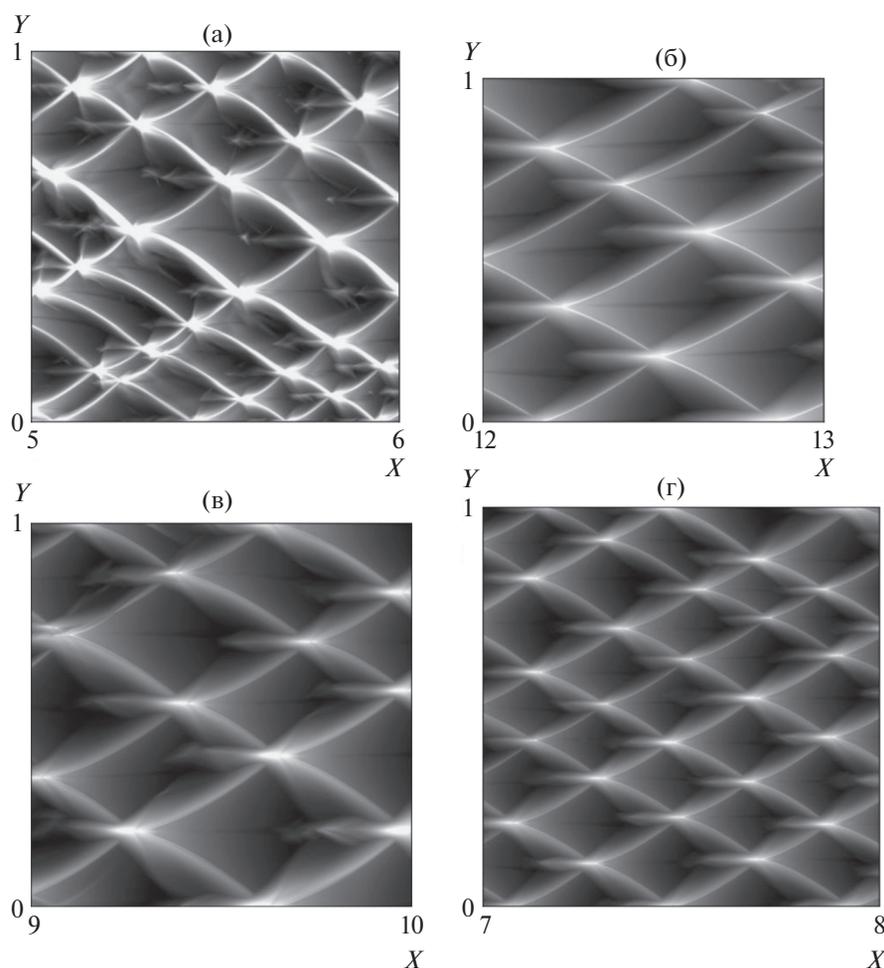


Рис. 1. Ячеистая структура детонационной волны, распространяющейся в плоском канале: а – стехиометрическая H_2 –воздух смесь; б – H_2 –воздух–80%Ag–1.5% O_3 ; в – H_2 –воздух–70%Ag–0.6% O_3 ; г – H_2 –воздух–70%Ag–1% O_3 . Здесь и далее $X = x/L$, $Y = y/L$, где L – ширина канала. Волна распространяется слева направо.

(x_{O_3} – мольная доля O_3) детонационная ячейка уменьшается в 3.2 раза, а скорость ячеистой детонационной волны увеличивается лишь на 0.5%. Отметим, что температура продуктов горения при добавлении озона меняется незначительно и близка к 3000 К.

Простым способом понизить температуру в продуктах детонации является добавление Ag, но внесение данной инертной добавки приводит к существенному росту детонационной ячейки. Однако добавление озона в разбавленную аргоном водородно-воздушную смесь уменьшит размер детонационной ячейки, при этом не увеличив существенно температуру в волне детонации. Проведенные расчеты показали, что мольные доли Ag и O_3 можно подобрать так, что размер детонационной ячейки в полученной смеси будет близок к среднему размеру ячейки в чистой водородно-воздушной смеси, при этом скорость вол-

ны и температура продуктов детонации будут существенно снижены. Так, получено, что размер ячейки волны в водородно-воздушной смеси с добавкой 80% Ag и 1.5% O_3 немного больше, чем в чистой смеси (рис. 1б), при этом температура в волне детонации близка к 1600 К, а скорость волны меньше скорости детонации в чистой смеси в 1.68 раза. Однако количество вносимого в смесь Ag можно уменьшить. Получено, что в случае 70% Ag и 0.6% O_3 в смеси формируется детонационная волна, размер ячейки которой немного превышает средний размер детонационной ячейки в чистой смеси (рис. 1в), а увеличение доли озона до 1% приводит к формированию волны детонации с более мелкой (по сравнению с чистой смесью) ячеистой структурой (рис. 1г). При этом температура продуктов горения близка к 2000 К, а скорость волны меньше скорости детонации в чистой смеси более чем в 1.5 раза. Кроме того, в отличие от детонационного горения смеси без

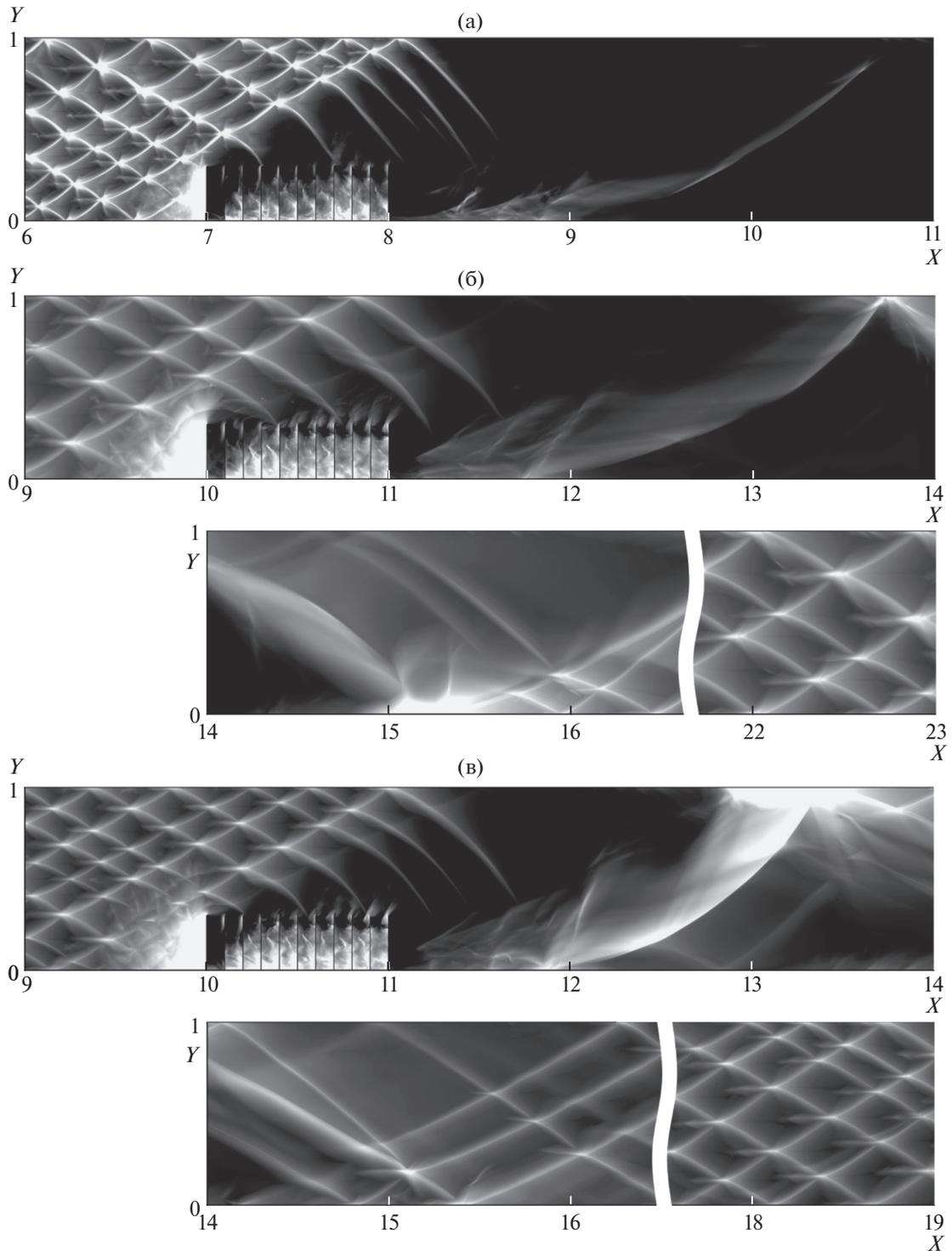


Рис. 2. Распространение детонационной волны в плоском канале при наличии области с барьерами ($L_b = 1$ см, $\Delta L_b = 0.1$ см, $H_b = 0.3$ см): а – разрушение детонации в стехиометрической H_2 –воздух смеси; б, в – сохранение детонационного горения в смесях H_2 –воздух–70%Ag–0.6% O_3 и H_2 –воздух–70%Ag–1% O_3 соответственно. Волна распространяется слева направо.

добавок волна детонации в смеси, разбавленной одновременно Ag и O_3 , имеет регулярную ячеистую структуру. Так, максимальное относительное отклонение поперечного размера детонаци-

онной ячейки от среднего в рассмотренных смесях не превышает 25%.

С целью исследования устойчивости детонационного горения смеси, полученной после до-

бавления Ar и O₃, рассмотрено взаимодействие сформированной ячейки волны детонации с расположенной в канале областью с барьерами. Подобная область является простой моделью вставки с пористым покрытием на внутренней поверхности канала, например, покрытой стальной ватой [12]. Возможность использования различных пористых покрытий стенок канала для гашения детонационного горения исследовалась в ряде работ, см., например, [13–15]. В случае области с барьерами параметрами, определяющими результат взаимодействия волны с препятствиями, являются протяженность области L_b , расстояние между соседними барьерами ΔL_b и высота барьеров H_b . Известно, что как в случае одиночного барьера [16], так и множественных препятствий [1, 2] (при фиксированных значениях L_b и ΔL_b) детонационная волна разрушается, если высота барьеров превышает некоторое критическое значение, зависящее от ширины канала. В результате проведенного численного моделирования установлено, что критическая высота препятствий в случаях смесей с добавками Ar и O₃ (в указанных выше концентрациях) выше, чем в случае чистой смеси при прочих постоянных параметрах. Численные следовые отпечатки, иллюстрирующие разрушение детонационной волны при взаимодействии с областью барьеров в чистой смеси и сохранение детонации после прохождения той же области в смеси с добавками Ar и O₃, представлены на рис. 2. Повышение устойчивости детонации к возмущениям, вызванным расположенными в канале препятствиями, в рассмотренных смесях с добавками обусловлено увеличением интенсивности формирующихся поперечных волн при прохождении детонации вдоль области барьеров, что является, по-видимому, следствием разложения озона за отраженными скачками между барьерами, которое сопровождается выделением энергии. В случае сохранения детонационного горения в смеси с добавками Ar и O₃ после прохождения области препятствий первоначально формируется детонация с более крупной ячейкой, размер которой постепенно уменьшается (рис. 2б, 2в). Такой механизм восстановления детонационного горения характерен для смесей с регулярной ячейкой детонации [17] и качественно отличается от механизма реиницирования детонации в чистой смеси [2].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Используя детальный кинетический механизм химического взаимодействия, численно исследовано влияние добавок аргона и озона в стехиометрическую водородно-воздушную смесь на параметры волны детонации. Установлено, что молярные доли вносимых добавок можно под-

бирать так, что средний размер ячейки волны детонации в полученной смеси будет близок к среднему размеру ячейки в чистой смеси при этом скорость волны и температура продуктов детонации будут существенно снижены. Обнаружено, что детонационная волна в смеси, полученной после внесения добавок, отличается от волны в чистой водородно-воздушной смеси регулярной ячейкой структурой. Показано, что внесение добавок в концентрациях, предотвращающих существенное увеличение размера детонационной ячейки, повышает устойчивость детонационного горения смеси к возмущениям, вызванным расположенными в канале препятствиями.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение от 29.09.2020 № 075-15-2020-806).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Левин В.А., Журавская Т.А. Управление детонационным горением посредством предварительной подготовки газовой смеси // Письма в ЖТФ. 2020. Т. 46. Вып. 4. С. 40–44. <https://doi.org/10.21883/PJTF.2020.04.49050.18074>
2. Журавская Т.А., Левин В.А. Управление детонационной волной в канале с препятствиями посредством предварительной подготовки газовой смеси // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 2020. № 4. С. 59–68. <https://doi.org/10.31857/S0568528120040131>
3. Левин В.А., Журавская Т.А. Управление детонационным горением в высокоскоростном потоке газовой смеси // Труды Матем. ин-та им. В.А. Стеклова. 2018. Т. 300. С. 123–134. <https://doi.org/10.1134/S0371968518010090>
4. Levin V.A., Zhuravskaya T.A. The Methods of Control of Stabilized Detonation Location in a Supersonic Gas Flow in a Plane Channel // Combustion Science and Technology. 2019. <https://doi.org/10.1080/00102202.2018.1557641>
5. Crane J., Shi X., Singh A.V., Tao Y., Wang H. Isolating the effect of induction length on detonation structure: Hydrogen–oxygen detonation promoted by ozone // Combustion and Flame. 2019. V. 200. P. 44–52. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2018.11.008>
6. Kumar D.S., Ivin K., Singh A.V. Sensitizing gaseous detonations for hydrogen/ethylene-air mixtures using ozone and H₂O₂ as dopants for application in rotating detonation engines // Proc. Combustion Institute. 2021. V. 38(3). P. 3825–3834. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.08.061>
7. Термодинамические свойства индивидуальных веществ / Под ред. В.П. Глушко и др. Т. I, кн. 2. М.: Наука, 1978. 328 с.
8. Bezgin L.V., Kopchenov V.I., Sharipov A.S., Titova N.S., Starik A.M. Evaluation of Prediction Ability of Detailed Reaction Mechanisms in the Combustion Performance

- in Hydrogen/Air Supersonic Flows // *Combustion Science and Technology*. 2013. V. 185 (1). P. 62–94. <https://doi.org/10.1080/00102202.2012.709562>
9. Родионов А.В. Монотонная схема второго порядка аппроксимации для сквозного расчёта неравномерных течений // *ЖВМиМФ*. 1987. Т. 27. № 4. С. 585–593.
 10. Voevodin V.I., Antonov A., Nikitenko D., Shvets P., Sobolev S., Sidorov I., Stefanov K., Voevodin Vad., Zhuravskiy S. Supercomputer Lomonosov-2: Large Scale, Deep Monitoring and Fine Analytics for the User Community // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. 2019. V. 6. № 2. P. 4–11. <https://doi.org/10.14529/jsfi190201>
 11. Pintgen F., Eckett C.A., Austin J.M., Shepherd J.E. Direct observations of reaction zone structure in propagating detonations // *Combustion and Flame*. 2003. V. 133 (3). P. 211–229. [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(02\)00458-3](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(02)00458-3)
 12. Bivol G. Yu., Golovastov S.V., Golub V.V. Detonation suppression in hydrogen–air mixtures using porous coatings on the walls // *Shock Waves*. 2018. V. 28 (5). P. 1011–1018. <https://doi.org/10.1007/s00193-018-0831-3>
 13. Шарыпов О.В., Пирогов Е.А. О механизме ослабления и срыва газовой детонации в каналах с акустически поглощающими стенками // *Физика горения и взрыва*. 1995. Т. 31. № 4. С. 71–76.
 14. Teodorczyk A., Lee J.H.S. Detonation attenuation by foams and wire meshes lining the walls // *Shock Waves*. 1995. V. 4 (4). P. 225–236. <https://doi.org/10.1007/BF01414988>
 15. Radulescu M.I., Lee J.H.S. The failure mechanism of gaseous detonations: experiments in porous wall tubes // *Combustion and Flame*. 2002. V. 131 (1–2). P. 29–46. [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(02\)00390-5](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(02)00390-5)
 16. Журавская Т.А. Распространение волн детонации в плоских каналах с препятствиями // *Известия РАН. Механика жидкости и газа*. 2007. № 6. С. 135–143.
 17. Qin H., Lee J.H.S., Wang Z., Zhuang F. An experimental study on the onset processes of detonation waves downstream of a perforated plate // *Proc. Combustion Institute*. 2015. V. 35 (2). P. 1973–1979. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2014.07.056>

CONTROL OF DETONATION COMBUSTION OF A HYDROGEN-AIR MIXTURE BY ARGON AND OZONE ADDITION

Academician of the RAS V. A. Levin^a and T. A. Zhuravskaya^a

^a *Lomonosov Moscow State University, Institute of Mechanics, Moscow, Russian Federation*

The influence of argon and ozone additions into a stoichiometric hydrogen-air mixture on the detonation wave parameters is numerically studied with the goal to reduce the wave propagation velocity and the temperature of the combustion products without significantly increasing the size of a detonation cell, which is a fundamental characteristic of the detonation ability of the mixture. It is established that the molar fractions of the additives introduced can be selected so that the cell size of the detonation wave in the resulting mixture will be close to the average cell size in a pure mixture, whereas the wave velocity and the temperature of the detonation products will be significantly reduced. It is found that the detonation wave in a mixture with additives in concentrations that do not allow a significant increase in the cell size is more resistant to disturbances caused by obstacles located in the channel than in a pure mixture. The study was carried out using a second-order scheme based on the Godunov method; a detailed kinetic mechanism was used to model chemical reactions.

Keywords: detonation wave, stoichiometric hydrogen-air mixture, cellular structure, argon, ozone