

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ В ИМПУЛЬСНОМ ДЕТОНАЦИОННОМ ДВИГАТЕЛЕ

С.Н.Мартюшов

Комитет по энергетике, Государственная Дума Федерального Собрания Российской Федерации, Москва

NUMERICAL SIMULATION OF DETONATION IN PULSE DETONATION ENGINE

S.N. Martyushov

Committee of energy, State Duma of Federal Assembly of Russian Federation, Moscow

The goal of this study is to investigate numerically the flow in a detonation engine. The simplified mathematical model of two-phase chemical reaction, including the induction period and the subsequent reaction period was used. The gas was assumed to be non viscous, and the one-stage Arrhenius model for chemical reaction rate was employed. Spatial discretization of the fluxes vector normal to the cell boundary direction is performed on the basis of two similar TVD-schemes: the slightly improved version of the Harten scheme and Chacravarty-Osher scheme. The suggested algorithm was also used for numerical simulations of flows in channels with constrictions.

Для численного моделирования течений реагирующих смесей кислород-водород и водород-воздух использовалась упрощенная двухстадийная модель, включающая индукционный период и последующий период реакции. Газ предполагался невязким.

Рассчитывалось нестационарное течение реагирующей смеси, возникающее в пульсационном детонационном двигателе конструкции, описанной в [1]. Целью численного моделирования являлось получение пульсационных режимов возникновения детонации в камере резонатора пульсационного детонационного двигателя. Кроме этого рассчитывались течения с переходом горение-детонация в каналах с сужениями.

Используемая модель двухстадийной реакцией, введенная в [2] может быть описана следующим образом. Система уравнений газовой динамики для идеального газа и упрощенные уравнения кинетики могут быть представлены в следующей интегральной форме:

$$d/dt \int_V \vec{Q} dV + \oint_S \vec{n} F dS + \Phi = 0 \quad (1)$$

где $\vec{Q} = (\rho, \vec{m}, \rho e, \rho \beta, \rho \alpha)$ - вектор консервативных переменных, $\vec{\alpha} = 1/\tau$ параметр индукции обратный к времени индукции, β - объемная плотность реагирующей компоненты, $\Phi = (0, 0, 0, 0, \rho w_\beta, \rho w_\alpha)$ - источниковый член, вектор потоков в нормальном к грани контрольного объема направлении может быть представлен в виде $F = (\vec{m}, \vec{m} \cdot \vec{m} / \rho + P I, \vec{m}(e + p) / \rho, \vec{m} \vec{B})$, где $P = \rho RT, e = RT / (\gamma - 1) + \vec{V}^2 / 2 + \beta q$, давление и энергия конечного объема, q - энергия реакции. Для описания скоростей изменения кинетических переменных используется гипотеза Аррениуса:

$$w_\alpha = \frac{d\alpha}{dt} = \frac{-1}{\tau_{ind}} = -k_1 \rho \exp(-E_1 / RT); w_\beta = \frac{d\beta}{dt} = \begin{cases} -k_2 P^2 \{ \beta^2 \exp(-\frac{E_2}{RT}) - (1 - \beta)^2 \exp(-\frac{E_2 + q}{RT}) \}, & \alpha = 0; \\ 0, & \alpha > 0, \end{cases} \quad (2)$$

Численный метод

Явный оператор шага разностного алгоритма представляется двумя способами: производится расщепление на симметричную последовательность операторов шага в направлении, которая сохраняет второй порядок точности по времени, если таким порядком точности обладает

оператор шага в направлении. Другим используемым способом дискретизации по времени является метод Рунге – Кутты третьего порядка точности

Для пространственной аппроксимации векторов потока в нормальном к грани контрольного объема направлении использовались две известные разностные TVD-схемы. Схема Хартена [3] с незначительной модификацией [4] может быть записана в виде:

$$\bar{F}_{j+1/2} = 1/2(\bar{F}_j + \bar{F}_{j+1} + \sum_{l=1}^m \bar{R}_{j+1/2}^l [1/2\Psi(a_{j+1/2}^l)(g_j^l + g_{j+1}^l) - q(a_{j+1/2}^l + \gamma_{j+1/2})\alpha_{j+1/2}^l]) \quad (3)$$

$$g_j^l = \lim iter(\alpha_{j+1/2}^l, \alpha_{j-1/2}^l), \Psi(z) = Q(z) - \lambda z^2;$$

$$\gamma_{j+1/2}^l = \begin{cases} \Psi(a_{j+1/2}^l)(g_{j+1}^l - g_j^l) / \alpha_{j+1/2}^l, \alpha_{j+1/2}^l \neq 0; \\ 0, \alpha_{j+1/2}^l = 0; \end{cases} \quad q(z) = \begin{cases} |z|, |z| \geq \delta; \\ (z^2 + \delta^2) / 2\delta, |z| \leq \delta, \end{cases}$$

где $\alpha_{j+1/2}^l = \bar{L}_{j+1/2}^l (\bar{Q}_{j+1} - \bar{Q}_j)$ - компоненты вектора характеристических переменных в дельта-форме., $a_{j+1/2}^l, \bar{R}_{j+1/2}^l, \bar{L}_{j+1/2}^l$ - собственные значения, правые и левые собственные векторы матрицы $A = \partial \bar{F} / \partial \bar{Q}$. Переход к характеристическим переменным является общим элементом TVD (а также ENO) схем, обеспечивающим расщепление системы уравнений газовой динамики (1) на отдельные уравнения.

Второй использованной схемой была схема Чакраварти-Ошера [5], в соответствии с которой вектор потока в нормальном к грани контрольного объема направлении представляется в виде:

$$F_{m+1/2} = H_{m+1/2} + \sum_i \left(\frac{1+\delta}{4} \tilde{\alpha}_{1,m+1/2}^i + \frac{1-\delta}{4} \hat{\alpha}_{2,m+1/2}^i \right) \lambda_{m+1/2}^{i+} r_{m+1/2}^i - \sum_i \left(\frac{1+\delta}{4} \hat{\alpha}_{2,m+1/2}^i + \frac{1-\delta}{4} \tilde{\alpha}_{3,m+1/2}^i \right) \lambda_{m+1/2}^{i-} r_{m+1/2}^i, \quad (4)$$

$$\text{где } H_{m+1/2} = \frac{1}{2} [F(Q_{m+1}) + F(Q_m)] - \frac{1}{2} \sum_i (\lambda_{m+1/2}^{i+} - \lambda_{m+1/2}^{i-}) \alpha_{2,m+1/2}^i \bar{r}_{m+1/2}^i;$$

$$\alpha_{1,j+1/2}^l = \bar{L}_{j+1/2}^l (\bar{Q}_{j+1} - \bar{Q}_j), \alpha_{2,j+1/2}^l = \bar{L}_{j+1/2}^l (\bar{Q}_j - \bar{Q}_{j-1}), \alpha_{3,j+1/2}^l = \bar{L}_{j+1/2}^l (\bar{Q}_{j+2} - \bar{Q}_{j+1})$$

$$\hat{\alpha}_{1,m+1/2}^i = \min \text{mod} \{ \alpha_{1,m+1/2}^i, b \alpha_{2,m+1/2}^i \}; \tilde{\alpha}_{2,m+1/2}^i = \min \text{mod} \{ \alpha_{2,m+1/2}^i, b \alpha_{1,m+1/2}^i \};$$

$$\hat{\alpha}_{2,m+1/2}^i = \min \text{mod} \{ \alpha_{2,m+1/2}^i, b \alpha_{3,m+1/2}^i \}; \tilde{\alpha}_{3,m+1/2}^i = \min \text{mod} \{ \alpha_{3,m+1/2}^i, b \alpha_{2,m+1/2}^i \}; b = (3-\delta)/(1-\delta), \delta = -1,1/3.$$

Обе численные схемы (3), (4) применялись в двух вариантах. В первом случае осуществлялся переход к характеристическим переменным для всей системы уравнений (1). Во втором случае производился переход к характеристическим переменным для системы уравнений газовой динамики. Последние два уравнения системы (1) для кинетических переменных α, β решались отдельно с помощью тех же алгоритмов, но для одного уравнения отдельно для α и β . Второй способ позволяет более просто распространить описанные алгоритмы для полной системы уравнений кинетики с произвольным числом реакций.

Структурированные эллиптические сетки для разностной задачи строились по алгоритму Томпсоновского типа [6], основанному на решении системы уравнений Пуассона [7].

Численное моделирование течений в импульсном детонационном двигателе.

Численно исследовалось течение в резонаторной камере импульсного детонационного двигателя [1], Рис.1. Различные конструкции детонационных двигателей исследовались в последние десятилетия. Детонация является крайне эффективным видом горения. Благодаря преимуществу почти изохорического процесса детонация обладает более высокой термодинамической эффективностью, чем эквивалентное изобарическое горение. Преимуществом рассматриваемого типа детонационного двигателя является отсутствие

движущихся частей в его конструкции. Двигатель состоит из реактора, где происходит смешение и предварительный подогрев газовой смеси и резонатора (Рис.1,а). Реагирующая смесь поступает из реактора в резонатор через кольцевое сопло. По идее авторов [1] сверхзвуковая струя, появляясь из кольцевого сопла, отражается от оси симметрии около центра полусферы-резонатора и порождает сферическую расходящуюся ударную волну, движущуюся к стенкам резонатора. После отражения от стенок сферическая ударная волна поджигает реагирующую смесь в полости резонатора и, двигаясь к центру сферы, фокусируется в детонационную волну. После фокусировки детонационная волна движется в направлении выхода из камеры резонатора, разрушая кольцевую струю. Происходит выброс продуктов горения из камеры резонатора с кратковременным запираем кольцевой струи. После этого описанный цикл течения повторяется. Параметры течения, исключая концентрацию горючей компоненты, которая считается заданной, сводится к отношению давления и температуры в реакторе и внешнем пространстве и отношению площадей выходного сечения кольцевого сопла и критического сечения. Начальные условия для давления и плотности в камере резонатора соответствуют атмосферным значениям P_0, ρ_0 . Переход к безразмерным переменным осуществляется делением газодинамических параметров на P_0 и ρ_0 . В рамках невязкой модели используются краевые условия непротекания и неотражающие условия на выходе из расчетной области на достаточном удалении от камеры резонатора (Рис.1,б, правая граница). В выходном сечении кольцевого сопла газодинамические параметры определяются точным решением сопла Лавала.

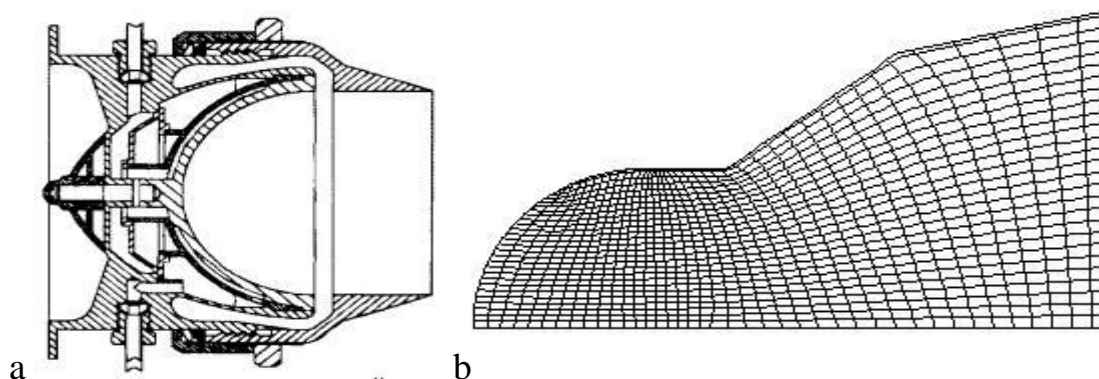


Рис.1 Схема резонатора импульсного детонационного двигателя (слева) и расчетная сетка, покрывающая область резонатора и внешнее пространство выхода струи.

Результаты расчетов представлены картиной изолиний плотности (серые линии) и плотности горючей компоненты (черные линии) на Рис.2, а,б. По результатам расчетов обнаружено два основных режима течения. При больших значениях отношения давления в выходном сечении кольцевого сопла к давлению в критическом сечении (в расчетах $P_{exit} / P_{critical} = 0.8$) наблюдается установление стационарного режима течения, при малых значениях отношения давления в выходном сечении кольцевого сопла к давлению в критическом сечении (в расчетах $P_{exit} / P_{critical} = 0.08$) наблюдается существенно нестационарный характер течения. Однако по наблюдениям картин изолиний детонация возникает не в окрестности центра полусферы резонатора, а в районе вихревой структуры вблизи кольцевой струи. Представляется, что такой механизм возникновения детонации более реалистичен, чем точная фокусировка детонационной волны в районе центра полусферы. Также различается положения точки отрыва потока: при $P_{exit} / P_{critical} = 0.08$ отрыв происходит на кромке выходного сечения резонатора, при $P_{exit} / P_{critical} = 0.8$ - на задней границе кольцевой струи.

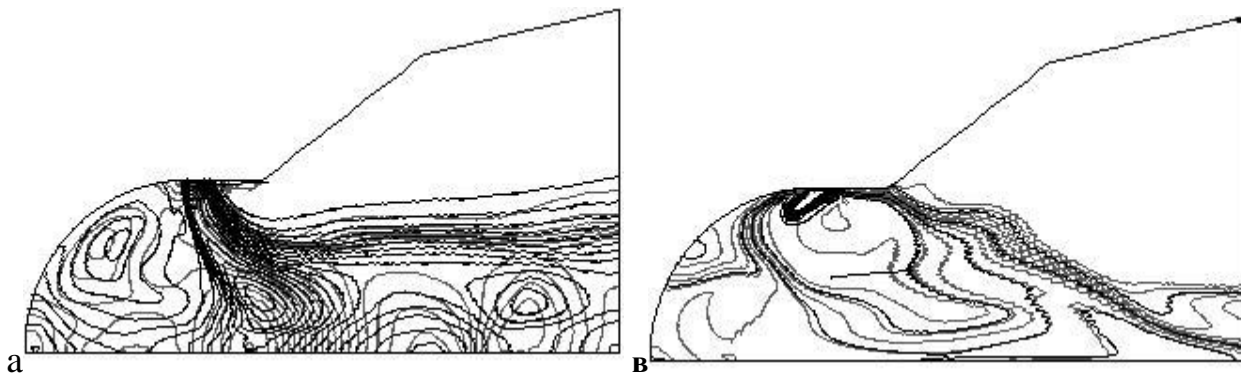


Рис.2 Картины изолиний плотности (светлосерые линии) и плотности горючей компоненты (черные линии) для отношения давления в выходном сечении кольцевого сопла к давлению в критическом сечении $P_{exit} / P_{critical} = 0.8$ (слева) и $P_{exit} / P_{critical} = 0.08$ (справа).

Численное моделирование течений в каналах сложной формы.

Рассмотренное течение в импульсном детонационном двигателе качественно меняется с изменением параметров течения в кольцевом сопле. Существенная зависимость от характера течения в соплах а торцевой стенке наблюдается также для ротационного детонационного двигателя [8] (при этом в [9] множество сопел Лавалья по окружности торцевой стенки заменяется одним сужением цилиндрического профиля ротационного детонационного двигателя). Ясно, что в реальных установках упомянутые сопла не являются, строго говоря, соплами Лавалья, а представляют собой некоторые каналы с сужениями. При численном моделировании работы проектируемых детонационных двигателей требуется исследовать режимы проникновения горения и детонации в камеры предварительной подготовки топлива. Кроме этого могут рассматриваться конструкции, в которых горение и детонация могут быть инициированы уже в соплах (инжекторах) по которым реагирующая смесь поступает в камеру сгорания. В этих условиях требуется отдельное детальное моделирование течений реагирующей газовой смеси в каналах с сужениями.

Численно моделировалось течение в каналах с одним и двумя сужениями специального вида [10], расчетная сетка для которых изображена на Рис.3. В начальный момент времени горючая смесь заполняла весь канал за исключением камеры заполненной ререагирующим газом под высоким давлением в левой части канала. Нереагирующий газ под высоким давлением $P_1 = 26 \text{ ат}$, $T_1 = 794 \text{ К}$ в начальный момент времени прорывает диафрагму и образует ударную волну высокой интенсивности, движущуюся направо. Ударная волна инициирует быстрое горение газа, которое для конфигурации Рис. 4, в переходит в детонационную волну. Детонационная волна догоняет фронт ударной волны. Для конфигурации Рис. 4, а, возникающий при тех же начальных параметрах падающей ударной волны, фронт быстрого горения не переходит в детонацию. В [10] были проведены численные расчеты, показавшие, что для инициации детонации в каналах с одним сужением Рис. 3, а требуются существенно более высокие значения давления в камере предварительного смешения горючей смеси, чем для двух сужений Рис. 3, в. На Рис.4 приведены картины изопикт (серые линии) и изолиний плотности горючей компоненты (черные линии) для канала с одним(а) и двумя (в) сужениями. Картины изолиний показывают, что для канала с одним сужением фронт горения отстает от головной ударной волны, а для двух сужений переходит в детонационную волну, которая догоняет головную ударную волну.

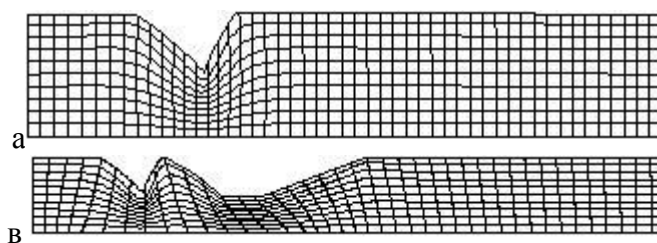


Рис. 3 Расчетная сетка для каналов с одним сужением (а) и двумя сужениями (в).

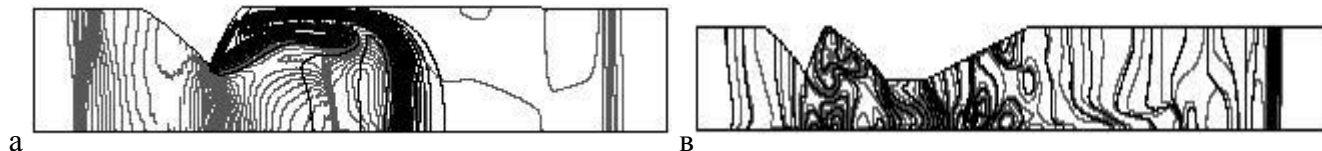


Рис.4 Изопикты (серые линии) и изолинии плотности горючей компоненты (черные линии) для канала с одним (а) и двумя (в) сужениями

Заключение.

На основе известных TVD-схем Хартена и Чакраварти-Ошера построены два численных алгоритма для решения задач горения и детонации реагирующих газовых смесей. Предполагается в дальнейшем заменить используемую упрощенную двухстадийную модель горения для идеального газа на полную систему уравнений кинетики для вязкого газа в рамках реализованных численных алгоритмов.

Список литературы

1. Левин В. А., Нечаев Ю. И., Тарасов А. И. Новый подход к организации рабочего процесса пульсирующих детонационных двигателей. *Химическая Физика*. 2001. т. 20, № 6. с. 90–98.
2. Korobeinikov VP, Levin VA, Markov VV, et al. Propagation of Blast Waves in Combustible Gas, *Astronautica Acta* 1972; 17:529-537.
3. Yee HC, Warming RE, Harten A. Implicit Total Variation Diminishing (TVD) Schemes for Steady-State Calculation. *J.Comp. Phys.* 1985; 57: 327-361.
4. Мартюшов С.Н. Расчет двух нестационарных задач дифракции на основе явной TVD схемы Хартена. *Вычислительные технологии* Том 1, № 2 Новосибирск, 1996, стр. 82-89.
5. Chakravarthy SR, Osher S, A new class of high-accuracy TVD schemes for hyperbolic conservation laws. *AIAA Paper*. 1985; 85 -0363.
6. Thompson JF, Warsi ZUA, Mastin CW. *Numerical Grid Generation*. NY: North Holland; 1985.
7. Martyushov SN. Numerical grid generation in computational field simulation. *Proceedings of the 6-th International Conf. Greenwich Great Britain*, 1998; p. 249.
8. Войцеховский Б.Ю. Стационарная детонация. *ДАН АН СССР*. 1959 Том 129(6):стр. 1251-1256.
9. Zhdan SA, Bykovskii F.A, Vedernikov F.F. Mathematical modeling of a rotating detonation wave in a hydrogen-oxygen mixture. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. 2007, 43(4): 449-459.
10. Семенов И.В., Уткин П.С, Марков В.В. "Численное моделирование двумерных детонационных течений на многопроцессорной вычислительной технике" *Выч. методы и программир*. 2008 Т. 9 с. 119-128.