

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИОННЫХ НЕУСТОЙЧИВОСТЕЙ В ВОДОРОД-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЯХ

*П. Е. Беляев<sup>1</sup>, И. Р. Макеева<sup>1,2</sup>, Д. А. Мастюк<sup>1</sup>, Е. Е. Пигасов<sup>1,2</sup>, Т. А. Куприянец<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия

<sup>2</sup>ФГАОУ ВО ЮУрГУ (НИУ), Челябинск, Россия

E-mail: belyaevpe@vniitf.ru

Важной задачей при оценке безопасности технологических процессов является определение детонационной способности газовой смеси. Одним из критериев возможности перехода горения к детонационному режиму распространения является отношение поперечного размера детонационных ячеек к характерному размеру помещения. Однако размеры экспериментальных установок налагают ограничения на подходящие для исследования составы. Численное исследование характеристик неустойчивостей детонационного фронта может снять ограничения натурального эксперимента. Тем не менее, согласно работе [1], возникновение неустойчивостей при моделировании распространения детонации не гарантирует корректное воспроизведение их характеристик, полученных в эксперименте. Как показано в работе, особенности неустойчивостей фронта существенно зависят от выбранного кинетического механизма. Таким образом, актуальной представляется разработка численной модели, позволяющей описывать процесс детонации в химически реагирующих сплошных средах.

При моделировании решается система уравнений законов сохранения модели многокомпонентной односкоростной сплошной химически реагирующей среды [2], замыкаемая уравнением состояния идеального газа. Скорость реакции определяется на основе законов Аррениуса и действующих масс [3]. Турбулентные величины вычисляются по модели Менгера SST [4]. Расчеты проведены в программном комплексе КЕДР [5] в подходе конечных объемов с размещением величин в центрах ячеек. Для повышения порядка аппроксимации на гладком течении использован ограничитель потока *minmod* [6]. На разрывном течении использован модифицированный метод Куропатенко [7]. Интегрирование по времени осуществлялось явным одношаговым методом первого порядка. Для решения жесткой системы уравнений химической кинетики использован жесткоустойчивый решатель на основе метода Гира [8].

В данной работе представлены промежуточные результаты разработки модели, включающие тестирование различных детальных кинетических механизмов Ранзи [9], GRI-3.0 [10] и Бабушка [11] на экспериментальных данных [12, 13, 14] по временам индукции в диапазоне температур от 850 К до 2200 К и давлений от 1 до 87 атмосфер.

С помощью механизмов, продемонстрировавших наилучшее согласие с экспериментальными данными, было произведено моделирование горения стехиометрической водород-воздушной смеси. Моделирование производится в стехиометрической водород-воздушной смеси с прямой инициацией детонации. Полученные в результате моделирования поля максимумов давлений представлены на рисунке 1.

Результаты анализа размера детонационных ячеек в выделенных на рисунке 1 областях представлены на рисунке 2. Для сравнения приведен размер детонационных ячеек, оцененный в экспериментальной работах [15, 16].

В работе проанализирована точность моделирования задержки воспламенения с помощью механизмов Ranzi, GRI-3.0 и В. И. Бабушка. Показано, что наиболее близкие к экспериментальным данным задержки воспламенения в широком диапазоне температур и давлений обеспечивает механизм Ranzi. Продемонстрировано влияние детального кинетического механизма на характеристики неустойчивостей детонационного фронта. Продемонстрирована возможность моделирования неустойчивостей детонационного режима горения с помощью ПК КЕДР.

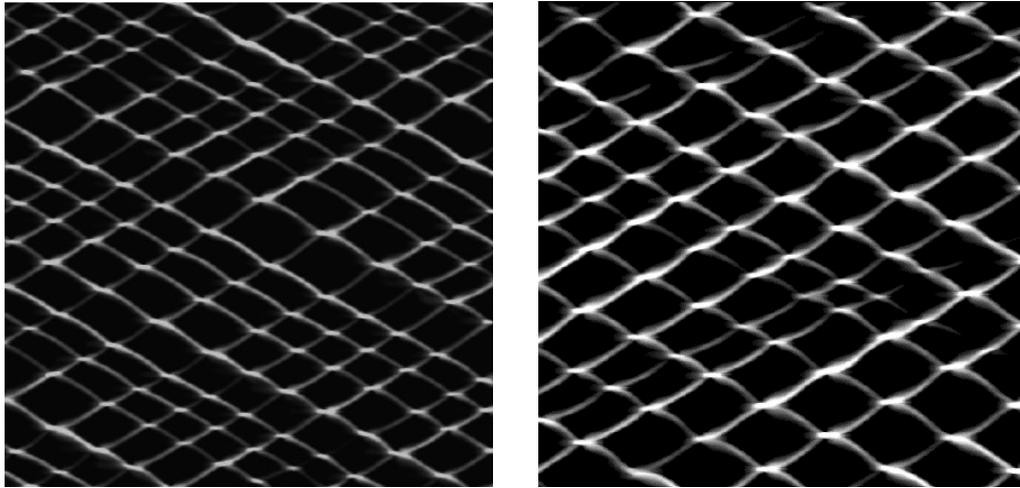


Рис. 1. Поля максимумов давления, полученные с помощью механизмов: левый – Ranzi [9], правый – Бабушок [11]

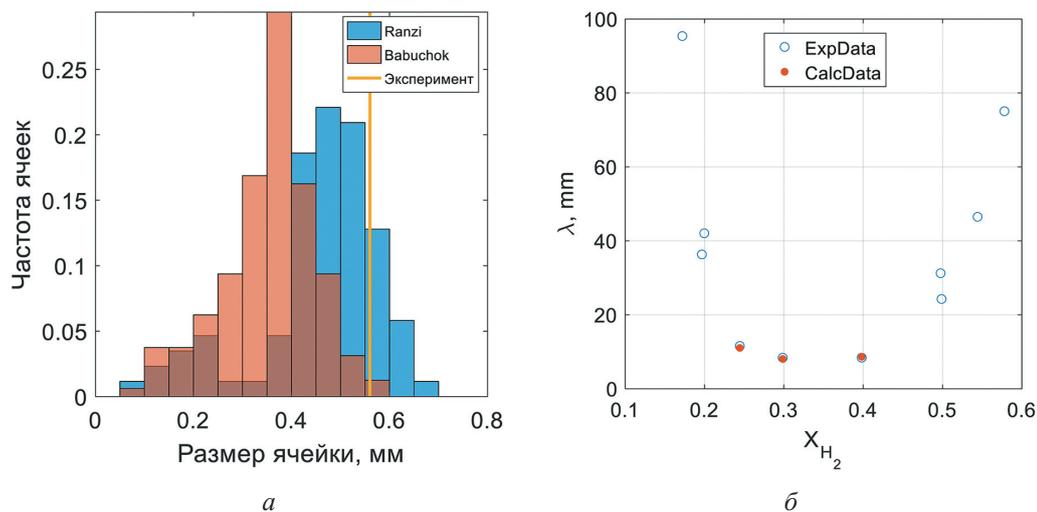


Рис. 2. Частота возникновения ячеек определенного размера (а). Экспериментальные данные [15]. Размер рассчитанных детонационных ячеек (б). Экспериментальные данные [16]

## Литература

1. **Борисов С. П.**, и др. // Физика горения и взрыва. – 2021.
2. Горение. Физ. и хим. Аспекты...: / Ю. Варнатц, и др. – 2003.
3. **Пигасов, Е. Е.**, и др. // Вестник ЮУрГУ ММП. – 2013.
4. **Menter, F. R.**, et al. // Turbulence, Heat and Mass Transfer. – 2003. – Vol. 4.
5. Свидетельство о гос. регистрации № 2023664620.
6. **Sweby, P. K.** // SIAM J. Numer. Anal. – 1984.
7. **Беляев, П. Е.**, и др. // Вестник ЮУрГУ ММП. – 2021.
8. **William Gear, C.** // Prentice-Hall. – 1971.
9. **Kéromnès, A.** et al. // Combustion and Flame. – 2013.
10. **Smith, G. P.**, et al., GRI-Mech 3.0.
11. **Бабушок, В. И.** и др. // Кинетика и катализ. – 1984. – Т. XXV. – Вып. 1.
12. **Herzler, J.**, Naumann C. // Proc. of the Comb. Institute. – 2009. – Vol. 32.
13. **Skinner, G. B.**, et al. // J Chem Phys. – 1965.
14. **Petersen, E. L.**, et al. // 20th Intl Symp on Shock Waves. – 1966.
15. Dorofeev. // State-of-the Art Report by a Group of Experts. – 2000.
16. **Ciccarelli, G.**, etc. // Technical Report. Brookhaven National Laboratory. – 1997.