

Математическое моделирование самовоспламенения и детонации водородно-воздушных смесей с использованием детального и глобального кинетических механизмов.

Р.С. Соломатин^{1,2}

¹Институт автоматизации проектирования РАН

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

При моделировании процессов горения и детонации в газах, важную роль играет расчет скоростей химических реакций, протекающих в газовой смеси. Для этого применяются полные или редуцированные кинетические механизмы. Полные или по-другому детальные кинетические механизмы горения могут содержать сотни реагирующих компонент и тысячи реакций и использование таких механизмов в математическом моделировании реагирующих течений подчас затруднено или полностью невозможно ввиду сложности реализации и больших вычислительных затрат. Однако детальные механизмы, как правило, позволяют правильно предсказывать задержки воспламенения и скорости фронта пламени в широком диапазоне начальных давлений, температур и состава смесей. Редуцированные механизмы состоят из небольшого количества реакций, в которых принимают участие только несколько базовых компонентов. Такие механизмы напротив очень просты в реализации и не требуют существенных вычислительных затрат при численном моделировании. Но они, в отличие от детальных, настраиваются под узкий диапазон рабочих давлений и температур, а, следовательно, область их применения сильно ограничена.

При моделировании газодинамических процессов на практике, особую роль играет смешение реагирующих компонентов, и часто необходимо моделировать процессы горения и детонации в сильно неоднородных по составу смесях. Коэффициент избытка топлива ϕ , характеризующий отношение объемной доли топлива к объемной доли окислителя в смеси к их отношению для стехиометрической смеси, в неоднородных смесях может варьироваться в широких пределах (например, от 0.3 до 4.5 для водородно-воздушной смеси). Давление и температура в разных областях реагирующей смеси также могут существенно отличаться.

Кинетические механизмы описываются некоторым количеством химических реакций, необратимых или обратимых. Выбранный для моделирования процессов горения и детонации, кинетический механизм описан в статье [1]. Данный механизм является детальным и содержит 9 компонент и 22 обратимые химические реакции. Три из этих реакций являются зависящими от давления и обладают двумя наборами констант. Скорость химической реакции для заданного давления определяется с использованием подхода Трое [2]. В настоящее время существует достаточно большое количество детальных кинетических механизмов для водородно-воздушных смесей, анализ наиболее известных из них проведен в работе [3]. В результате исследования механизмов на большом наборе экспериментальных данных кинетический механизм из [1] показывает один из лучших результатов по величинам задержек самовоспламенения смеси при различных начальных условиях.

Данный кинетический механизм был реализован в рамках программного комплекса, применяемого в ИАП РАН для решения задач многомерного моделирования реагирующих газовых течений. С использованием ЗНД модели были проведены расчеты зоны реакции за детонационной волной в водородно-воздушных смесях с различным коэффициентом избытка топлива. На *Рисунок 1*. изображены профили удельного тепловыделения за детонационной волной в зависимости от состава смеси. Максимумы удельного тепловыделения совпадают с величинами задержек самовоспламенения, характерных для начальных условий, с которыми проводился расчет. Также был произведен расчет скоростей детонационной волны для водородно-воздушной смеси с разным коэффициентом избытка топлива и проведено сравнение их с данными из [4]. Результат по сравнению скоростей распространения детонационной волны при различных коэффициентах избытка топлива приведен на *Рисунок 2*. Полученные задержки

самовоспламенения и скорости детонационной волны находятся в хорошем соответствии с результатами, полученными с использованием кинетических механизмов Коннова и Тана [4]. В заключение было проведено сравнение данного механизма с двумя глобальными механизмами по задержкам самовоспламенения, скорости детонационной волны и скорости удельного тепловыделения.

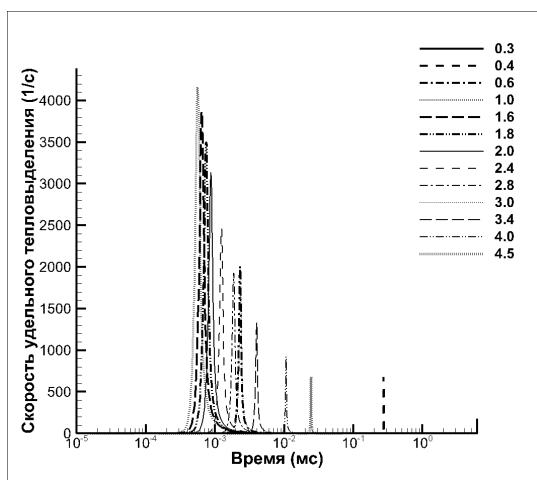


Рисунок 1. Скорость удельного тепловыделения в зависимости от коэффициента избытка топлива.

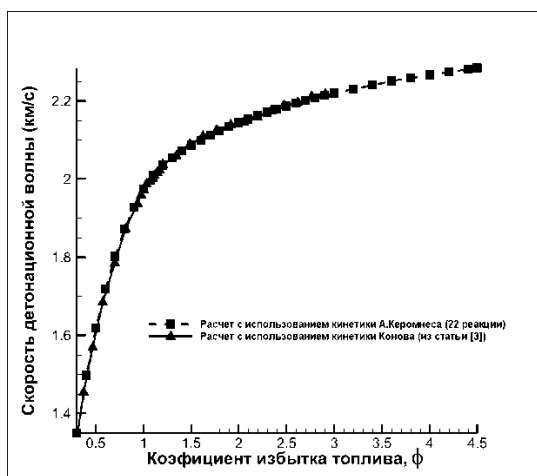


Рисунок 2. Скорость детонационной волны в водородно-воздушной смеси в зависимости от коэффициента избытка топлива.

Литература

1. Alan Keromnes et al. An experimental and detailed chemical kinetic modeling study of hydrogen and syngas mixture oxidation at elevated pressures// Combustion and Flame 160. 2013. P. 995 – 1011.
2. R. G. Gilbert, K. Luther, and J. Troe. Theory of Thermal Unimolecular Reactions in the Fall-off Range. II. Weak Collision Rate Constants//Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 87:169. 1983. P. 169-177.
3. C. Olm et al. Comparison of the performance of several recent hydrogen combustion mechanisms//Combustion and Flame. 2014.
4. E. Schulz, J. Shepherd. Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation//Explosion Dynamics Laboratory Report FM99-5. 2000