

Расчет размера детонационной ячейки в двухтопливных смесях углеводородов с воздухом

И. В. Тетервова^{1}, П. А. Фомин^{1,2}, А. В. Троцюк²*

¹ Сибирский государственный университет геосистем и технологий, г. Новосибирск, Российская Федерация

² Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, г. Новосибирск, Российская Федерация

*e-mail: ira_tet@mail.ru

Аннотация. Представлены двустадийные обобщенные модели химической кинетики горения двухтопливных газовых смесей CO-H₂ и CH₄-H₂ при детонационных давлениях и температурах. Сделаны двумерные численные расчеты параметров и ячеистой структуры детонационной волны в рассматриваемых смесях при различных соотношениях между горючими. Химические реакции описывались по предложенным кинетическим моделям. Результаты расчетов хорошо соответствуют эксперименту. Результаты работы могут быть использованы при решении проблем безопасной транспортировки, а также технологического и технического использования рассматриваемых смесей в двигателе- и машиностроении и переработке органических отходов. Например, при расчете параметров двигателей, работающих на непрерывной детонации, разработке установок по детонационно-газовому нанесению порошковых покрытий и детонационной утилизации органических отходов, решения вопроса о возможности транспортировки водорода через имеющиеся газотранспортные системы для природного газа.

Ключевые слова: двухтопливная смесь, обобщенная модель кинетики, детонация, ячейка, синтез-газ, метан-водород, окись углерода-гексан

Modeling of combustion kinetics and calculation of the cellular structure of a detonation wave in two-fuels gaseous mixtures

I. V. Tetervova^{1}, P. A. Fomin^{1,2}, A. V. Trotsyuk²*

¹ Siberian State University of Geosystems and Technologies, Novosibirsk, Russian Federation

² Lavrent'ev Institute of Hydrodynamics SB RAS, Novosibirsk, Russian Federation

*e-mail: ira_tet@mail.ru

Abstract. Generalized two-step chemical kinetic models of combustion of two-fuel stoichiometric mixtures of synthesis-gas and CH₄-H₂ with air at detonation pressures and temperatures are presented. Two-dimensional numerical calculation of cellular detonation wave parameters and structure in the mixtures under consideration at different relations between fuels has been done. Chemical transformations were described in the frames of the proposed kinetic models. The calculation results are in good agreement with experiment.

Keywords: two-fuel mixture, synthesis gas, kinetic model, detonation, cell, numerical simulation

Введение

Газовая детонация характеризуется экстремально высокими скоростями, температурами и давлениями газового потока за ударным фронтом волны. В настоящее время эти уникальные свойства интенсивно используются в наукоемких производствах и высокотехнологичных технических устройствах. Например, США, члены Европейского Союза, Китай и Россия интенсивно разрабатывают реактивные дви-

гатели, основанные на непрерывной вращающейся детонации [1]. Подобные двигатели отличаются повышенной тягой, высокой скоростью и эффективностью тепловыделения по сравнению с традиционными аналогами, основанными на горении топлив. Широкое распространение в машиностроении получило детонационно-газовое нанесение износостойких порошковых покрытий. Газовая детонация используется для удаления заусенцев, штамповке и утилизации органических отходов. В рассматриваемых технологиях и устройствах планируется использовать двухтопливные газовые смеси CO-H_2 (синтез-газ) и $\text{CH}_4\text{-H}_2$. Они дешевы и технологичны. Предполагается, что изменением относительной концентрации топлив можно управлять параметрами и структурой детонационной волны. К сожалению, детонационные характеристики рассматриваемых бинарных смесей до сих пор изучены недостаточно, что сдерживает развитие перспективных детонационных технологий в двигателе- и машиностроении, зеленой энергетике и индустрии утилизации отходов.

В последние годы широко обсуждаются хорошие перспективы водородной энергетике. Но есть масса как технических, так и экономических проблем, которые необходимо преодолеть для реализации подобных планов. Одна из них состоит в необходимости транспортировки водорода на большие расстояния. Широкой сети соответствующих газопроводов нет, и для их создания необходимо время и большие финансовые затраты. В этой связи представляется интересным рассмотреть вопрос о возможности транспортировке водорода совместно с природным газом по имеющейся системе газопроводов. Решение этого вопроса невозможно без исследования детонационных характеристик метано-водородных смесей.

Известно [2], что траектории локальных областей повышенного давления, связанных с наличием поперечных волн на фронте детонационной волны (ДВ), образуют самоорганизующуюся ячеистую структуру, по своей форме похожую на пчелиные соты. Поперечный размер элементарной детонационной ячейки принадлежит к числу важнейших характеристик, определяющих детонационное поведение газовых смесей, и, в конечном итоге, их практическое использование. Например, от него зависят режимы распространения ДВ, динамика волны в городской и промышленной и застройке сложной геометрии, пределы детонации по концентрации реагирующих компонент и условия ее инициирования [2].

Многолетняя практика расчета размеров детонационной ячейки связана, в основном, со смесями только одного углеводородного горючего с окислителем. Для рассматриваемых бинарных смесей расчет размера детонационной ячейки не проводился, а соответствующие экспериментальные измерения носили крайне фрагментарный характер.

Моделирование параметров и структуры ДВ невозможно без расчета химических превращений, которое, в основном, выполняется в рамках обобщенных кинетических моделей. Они позволяют вычислять тепловой эффект, молярную массу, внутреннюю энергию и показатель адиабаты газовой смеси без расчета ее детального химического состава. К сожалению, подобные модели для рассматриваемых бинарных смесей отсутствуют.

В рамках настоящей работы решены две взаимосвязанные задачи. Представлены обобщенные кинетические модели детонационного горения бинарных стехиометрических газовых смесей (синтез-газ и метан-водород) с воздухом. Сделаны двумерные численные расчеты структуры детонационной ячейки в рассматриваемых смесях. Расчет химических превращений при этом осуществлялся в рамках предложенных моделей кинетики.

Модели кинетики

Предлагаемые кинетические модели являются двухстадийными. Первая стадия – период индукции, вторая – зона основного тепловыделения.

Для расчета периода индукции предложены формулы Аррениусовского типа. Входящие в них константы представляют собой алгебраические комбинации соответствующих величин из известных выражений для расчета периода индукции в отдельных горючих, составляющих рассматриваемые двухтопливные смеси.

Для расчета молярной массы в зоне основного тепловыделения предложено использовать одно обыкновенное дифференциальное кинетическое уравнение. Тепловыделение, внутренняя энергия и показатель адиабаты смеси рассчитываются по явным алгебраическим формулам. Модели позволяют рассчитывать термодинамические параметры (в том числе молярную массу и внутреннюю энергию смеси) и в состоянии химического равновесия.

Результаты численного расчета детонационных ячеек

Изложенные модели кинетики использованы для двумерного численного расчета ячеистой структуры ДВ в смесях (1) и (2). Применялся численный алгоритм, описанный в [3].

Расчет для синтез-газа представлен на рис. 1.

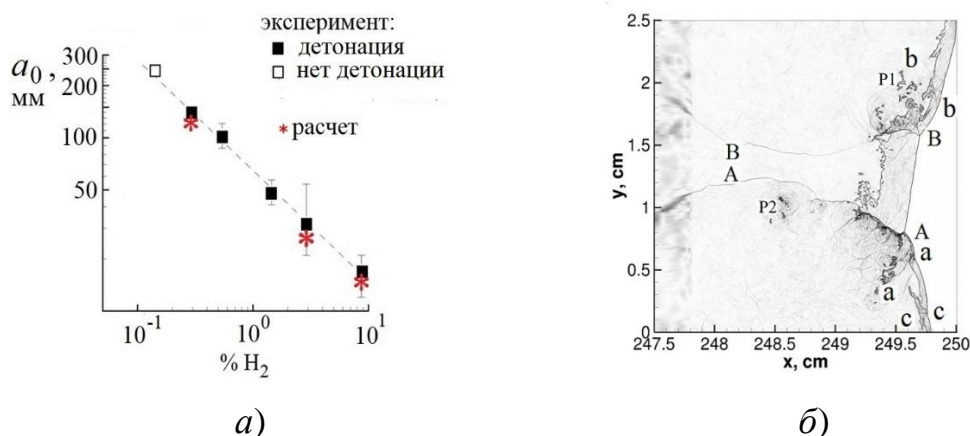


Рис. 1. Расчет параметров ДВ в стехиометрической смеси синтез-газа с воздухом:

а) зависимость скорости волны от соотношения между горючими; б) численная шпирен визуализация расчетной структуры движущейся слева направо волны в смеси $0.9CO + 0.1H_2 + \text{воздух}$; AA и BB – основные поперечные волны. aa, bb, cc – вторичные поперечные волны. P1, P2 – карманы несгоревшего газа.

Видно, что зависимость скорости ДВ от концентрации водорода (соотношения между горючими) хорошо коррелирует с экспериментом [4] (рис. 1(а)). В дополнение к основным поперечным волнам, движущимся в противоположных направлениях (как это имеет место в регулярных ячеистых структурах), формируются вторичные поперечные волны и карманы несгоревшего газа. Это свидетельствует о нерегулярности многофронтной волны (рис. 1(б)). При увеличении концентрации СО волновая структура эволюционирует от регулярной к нерегулярной. Число и интенсивность поперечных вторичных волн растет, и, соответственно, степень нерегулярности ячеистой структуры возрастает (в точном соответствии с экспериментом [4]).

Выводы

Предложенные физически обоснованные обобщенные модели кинетики детонационного горения бинарных газовых смесей просты и удобны для использования в рамках численного моделирования детонационных структур. Они существенно сокращают объем численных расчетов по сравнению с детальными кинетическими вычислениями. Модели физически обоснованы и соответствуют принципу Ле Шателье и второму началу термодинамики.

Предложенные кинетические модели верифицированы на двумерных численных расчетах ячеистых детонационных структур в синтез-газе и метано-водородной смеси. Полученные размеры детонационных ячеек, структура ДВ и ее перестройка при изменении соотношения между горючими компонентами хорошо соответствуют эксперименту.

Результаты работы могут быть использованы при решении проблем безопасной транспортировки, а также технологического и технического использования рассматриваемых смесей в двигателе- и машиностроении и переработке органических отходов. В частности, при (i) разработке авиационных двигателей, работающих на непрерывном детонационном сгорании топлива, (ii) проектировании установок по детонационной утилизации органических отходов и (iii) оборудования для детонационно-газовому нанесению порошковых покрытий, решения вопроса о возможности транспортировки водорода через имеющиеся газотранспортные системы, предназначенные для доставки природного газа.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Ф.А. Быковский, С.А. Ждан. Непрерывная детонация смесей CH_4/H_2 -воздух при варьировании геометрии кольцевой камеры сгорания. // Физика горения и взрыва, 2020. Т. 55. No. 5. С. 49-56.
2. Yu. A. Nikolaev, A. A. Vasil'ev, V. Yu. Ul'yanitskii. Gas detonation and its application in engineering and technologies // Combustion, Explosion and Shock Waves, 2003. Vol. 39. No. 4. P. 382-410.
3. А.В. Троцюк, П.А. Фомин. Моделирование нерегулярной ячеистой структуры детонационной волны в двухтопливной смеси // Физика горения и взрыва. 2019. Т. 54. No. 4. С. 15- 20.
4. J.M. Austin, J.E. Shepherd. Detonation in hydrocarbon fuel blends // Combustion and Flame, 2003. Vol. 132. No. 1-2. P. 73-90.

© И. В. Тетерова, П. А. Фомин, А. В. Троцюк, 2022