

Моделирование камеры сгорания двигателя с вращающейся детонационной волной

Е. В. Михальченко^{1,2,*}, В. Ф. Никитин^{1,2}, Л. И. Стамов^{1,2}, Ю. Г. Филиппов¹

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, 119992, Россия

²Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва, 117218, Россия

*Контактный автор: Михальченко Елена Викторовна, e-mail: MikhailchenkoLena@yandex.ru

Поступила 20 декабря 2019 г., доработана 25 сентября 2020 г., принята в печать 19 октября 2020 г.

Рассмотрено трехмерное численное моделирование камеры сгорания двигателя с непрерывной детонационной волной с помощью авторского программного пакета. Программное обеспечение использует для многокомпонентного химически реактивного газа математическую модель с опциональным подключением модели турбулентности. В основе модели химической кинетики лежит механизм элементарных реакций, в зависимости от механизма меняется число реакций. В программе, в том числе, реализован авторский кинетический механизм. Рассмотрены шесть кинетических механизмов: Мааса – Варнаца – Поупа, Хонга, Вильямса, Gri-Mech 3.0, Ли – Джоу – Казакова – Драера и авторский, проведено их сравнение. Код распараллелен с помощью технологий OpenMP и MPI. В результате работы программы получена оптимальная форма камеры сгорания с самоподдерживающейся детонационной волной на смеси водорода с кислородом.

Ключевые слова: математическое моделирование, детонация, дефлаграция, двигатель с вращающейся детонационной волной, химическая кинетика.

Цитирование: Михальченко Е.В., Никитин В.Ф., Стамов Л.И., Филиппов Ю.Г. Моделирование камеры сгорания двигателя с вращающейся детонационной волной. Вычислительные технологии. 2021; 26(1):33–49.
DOI:10.25743/ICT.2021.26.1.003.

Введение

В горючих газовых смесях выделяют два режима распространения пламени: медленное горение или дефлаграция и быстрая детонация. При детонации ведущая ударная волна высокой интенсивности нагревает горючую смесь и сжимает ее, затем следуют химические реакции, которые приводят к интенсивному выделению тепла, подпитывающего ведущую волну. Порядок скорости распространения детонации составляет несколько километров в секунду. Давление в детонационной волне может увеличиваться в несколько десятков раз в отличие от обычного горения, где оно практически не меняется. Благодаря этим факторам двигатель, основанный на детонации в горючей смеси, может быть значительно эффективнее, чем двигатель, основанный на классической схеме [1]. Впервые эта идея была предложена Зельдовичем [2]. Возможность

использования детонационного горения в двигательных установках реализована Николсом и его соавторами, был построен и испытан первый импульсный детонационный двигатель [3]. Войцеховский [4, 5] первым предложил и реализовал метод непрерывного горения газовой смеси в поперечных детонационных волнах, циркулирующих в тороидальной камере. Применение детонационного горения в двигателе обеспечивает не только более высокую термодинамическую эффективность, но и более высокую скорость выделения энергии и более компактную камеру сгорания по сравнению с обычными двигателями, основанными на традиционных схемах.

Существует два основных типа детонационных двигателей: пульсирующий и двигатель с вращающейся детонационной волной. В свою очередь, среди двигателей с вращающейся детонационной волной по типу геометрии камеры выделяют: цилиндрический с внутренним телом, пустотелый (без внутреннего тела), эллиптический (поперечное сечение — эллипс) и дисковый [6].

В работе [7] проведен эксперимент со сжиганием ацетилен-кислородной смеси в режиме спиновой детонации, исследованы области существования и структура поперечных детонационных волн, определены пределы давления в камере при непрерывной детонации. В [8] представлены результаты экспериментального и численного исследований вращающейся детонации. Экспериментальное исследование сосредоточено на оценке геометрии камеры детонации и условий, при которых вращающаяся детонационная волна может распространяться в цилиндрических каналах. Рассмотрены бедные водород-воздушные смеси, а также проведено 2D-моделирование данного процесса. В [9] выполнено трехмерное численное моделирование камеры сгорания двигателя кольцевого типа, работающего на однородной стехиометрической смеси водород-воздух. В [10] численно и экспериментально исследовано распространение газовой детонации в коаксиальном цилиндре для водород-воздушных смесей, при этом использована система уравнений Эйлера. В работе [11] проведено экспериментальное исследование поведения вращающейся детонационной волны в стехиометрической водород-воздушной смеси для четырех типов геометрии камеры сгорания с целью определения влияния параметров камеры на детонацию и количество детонационных волн. Двигатели пустотелого типа рассмотрены в [12]. Используя одношаговую модель химической кинетики и уравнения Эйлера в цилиндрических координатах, авторы провели серию трехмерных численных расчетов и получили режим работы двигателя с вращающейся детонационной волной. Трехмерное численное моделирование двигателя такого типа, а также двигателя с кольцевой камерой с помощью пакета ANSYS Fluent выполнено в работе [13].

Конструкция дискового двигателя впервые предложена Быковским [14]. В дисковой камере сгорания реализована вращающаяся детонационная волна, в которой сжигались водород, метан и распыленное жидкое топливо (керосин и дизельное топливо), смешанные с воздухом. В работе [15] впервые проведено исследование сжигания бурого угля в режиме спиновой детонации при добавлении твердых минералов (диоксида титана) и воды. В [16] представлены результаты экспериментов с дисковой детонационной камерой сгорания. Для изучения структуры возникающих процессов авторы использовали камеру сгорания со стеклянными стенками.

Экспериментальное исследование вращающейся детонационной волны в камерах сгорания эллиптической формы в смеси водород-кислород-азот выполнено в работе [17] для различных объемных долей кислорода и соотношений компонентов. Было получено, что для данного типа геометрии камеры условия поддержания стабильной детонационной волны более жесткие, чем для обычной кольцевой камеры сгорания, из-за

возникновения дефлаграции в зонах искривления и акустических режимов, влияющих на восстановление фронта детонации.

При моделировании процессов горения и детонации в газовых смесях часто используют редуцированный кинетический механизм. Например, в работе [18] рассмотрено моделирование трехмерного нестационарного течения с вращающейся детонационной волной, возникающей в кольцевом зазоре двигателя между двумя параллельными плоскостями, перпендикулярными его оси симметрии, для описания химических реакций в горючей смеси углеводородов с воздухом применена одностадийная кинетика — исследована одна необратимая реакция.

Для моделирования процесса раздельной подачи и перемешивания компонентов смеси в камере сгорания необходимо рассматривать детальный кинетический механизм. В настоящей работе использован кинетический механизм горения водород-кислородной смеси с учетом реакций различного типа: обменных реакций первого рода, реакций рекомбинации (второго рода), реакций с учетом их обратимости (реакций диссоциации). Проведено сравнение результатов использования различных кинетических механизмов для смеси водород-кислород при моделировании процессов, протекающих в камере сгорания детонационного двигателя.

Разработано программное обеспечение для изучения особенностей процесса зажигания и стадии перехода в режим вращающейся детонационной волны в трехмерной постановке задачи нестационарного состояния.

1. Математическая модель

Математическая модель, описывающая процессы в камере сгорания двигателя, включает уравнения баланса для многокомпонентной смеси горючего и окислителя с учетом химических превращений и эффектов турбулентного переноса массы, импульса и энергии. Используются следующие уравнения:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_k u_j)}{\partial x_j} - \frac{\partial J_{k,j}}{\partial x_j} = \dot{\omega}_k, \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{i,j}}{\partial x_j} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial E_T}{\partial t} + \frac{\partial ((E_T + p) u_j)}{\partial x_j} - \frac{\partial (J_{T,j} + u_i \tau_{i,j})}{\partial x_j} = \dot{Q}. \quad (3)$$

Здесь ρ_k — парциальная плотность компонента k ; $J_{k,j}$ — компоненты вектора диффузионного потока компонента k ; $\dot{\omega}_k$ — интенсивность образования компонента k в химических реакциях; ρ — плотность газовой смеси; u_i и u_j — компоненты вектора скорости газа; p — давление смеси; $\tau_{i,j}$ — компоненты тензора вязких и турбулентных напряжений; E_T — полная внутренняя энергия единицы объема газа: сумма тепловой, химической, кинетической и турбулентной энергий; $J_{T,j}$ — компоненты вектора потока тепловой и химической энергий; \dot{Q} — интенсивность притока тепловой энергии из внешнего источника. В уравнениях (1)–(3) и везде далее, если не сказано иного, по повторяющимся индексам производится суммирование; индекс k пробегает значения $1 \dots N_c$ (число компонентов), индексы i, j — значения $1, 2, 3$ (перечень координат). Всего в трехмерной системе $N_c + 4$ уравнения, не считая уравнений модели турбулентности. Последняя

определяет потоки переноса $J_{k,j}$ и $J_{T,j}$, а также тензор напряжений в газовой смеси, представленный в виде суммы шаровой части и девиатора ($-p\delta_{i,j} + \tau_{i,j}$). В случае, когда турбулентность при моделировании не учитывается, p означает термодинамическое давление газа. Уравнения (1)–(3) дополняются алгебраическими соотношениями из [19]. В работе использована $k - \Omega$ -модель турбулентности Уилкокса [20].

Численная модель данной системы уравнений основана на методе конечных объемов с совместным размещением переменных в центрах ячеек. Для аппроксимации математической модели использована схема высокого порядка точности AUSMP (Advection Upstream Splitting Method Plus) с предварительной интерполяцией переменных на грани контрольного объема методом MUSCL (Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws) [21, 22].

Шаг по времени определялся критерием Куранта – Фридрихса – Леви с учетом влияния турбулентной диффузии и вязкости на устойчивость явной схемы; при реализации алгоритма расчета перехода от одного момента времени к следующему использовалось распараллеливание OpenMP. Оно включало четыре основных цикла, служивших для перехода на новый шаг по времени: цикл по ячейкам (расчет дополнительных переменных и величины шага по времени), цикл по граням (расчет потоков через грани), цикл по ячейкам (расчет объемных потоков, в том числе потоков массы за счет химических взаимодействий) и последний цикл по ячейкам — сборка всех потоков с переходом на новый временной шаг.

Расчеты проводились на равномерной сетке из кубических ячеек. Форма расчетной области, как и начальные и граничные условия по домену, задавались пользователем программного комплекса. Сам программный комплекс состоит из следующих основных частей: построение сетки, построение начального состояния, расчет переходов на новые слои по времени с периодической записью промежуточных и окончательных данных и возможностью возобновления прерванного расчета из сохраненного состояния, обработка результатов.

2. Граничные условия

При моделировании камеры сгорания двигателя использовались граничные условия трех типов: стенка, до- и сверхзвуковые приток и отток. На стенке принято условие непроницаемости (нормальная составляющая скорости равна нулю), отсутствие химических взаимодействий со стенками (потоки диффузии на них равны нулю), поток тепла к стенке определяется заданной ее температурой. Условие прилипания, условия для параметров турбулентности, а также соотношения между температурой стенок и их тепловым потоком реализуются с использованием модели пристеночных функций. Эти функции определяют профили касательной скорости и температуры и выделяют специфические области вблизи стенок (вязкие, логарифмическую) и внешнюю. Для расчета турбулентности вблизи участков застоя в непосредственной близости от стенок использован подход Лаундера [23]; подробное описание граничных условий приведено в [24–26].

Условия притока смеси из отверстий снизу и на боковых стенках определяются температурой и давлением торможения, а также концентрацией компонентов. Предполагается, что на каждой поверхности притока газовая смесь адиабатически ускоряется до скорости звука, тем самым на поверхностях входа в камеру давление и температура уменьшаются в отличие от их значений при торможении. В случае, когда давление

в ячейке, примыкающей к входной поверхности, выше значения давления при торможении, поток блокируется и поверхность входа воспринимается как стенка. Для оттока смеси из камеры приняты условия свободного потока: если поток является сверхзвуковым, то он определяется условиями в ближайшей к границе ячейке, если дозвуковым — для определения потока импульса используется условие заданного внешнего давления.

3. Кинетический механизм

В результате горения газовой смеси водород – кислород помимо основного продукта реакции — водяного пара образуется несколько радикалов (компонентов, не существующих длительное время в стабильном состоянии при нормальных условиях). Состав горючей смеси, использованной в экспериментах, указан в таблице.

Рассмотрены шесть механизмов химических превращений в горючей газовой смеси с одним и тем же набором компонентов. Это механизмы Мааса – Варнаца – Поупа (19 реакций) [27], Хонга (20 реакций) [28], Вильямса (22 реакции) [29], Gri-Mech 3.0 (20 реакций) [30], Ли – Джоу – Казакова – Драера (18 реакций) [31] и авторский механизм (20 реакций) [32].

Алгебраические соотношения, определяющие динамику превращения компонентов в химическом механизме, не только сложны, но и делают полученную систему уравнений жесткой по концентрациям компонентов и температуре. Причина в том, что даже при малом изменении температуры на некоторых ее интервалах скорости многих реакций могут меняться на порядки. Математически это проявляется через зависимости Аррениуса. Явное решение жесткой системы требует весьма малого шага по времени (шага на порядки меньше газодинамического, определяемого критерием Куранта), что неприемлемо.

В работе использован полунявный метод Новикова [33], который является модификацией методов Розенброка с автоматическим контролем точности. Метод требует однократного расчета якобиана правой части системы уравнений и двукратного расчета самой его правой части; дополнительного тестирования точности шага этих операций не требуется.

На рис. 1 представлено изменение температуры во времени для теста самовоспламенения. Тест сделан в нульмерной постановке (единственная координата — время); начальное состояние — водород с воздухом, заданы условия сохранения объема. Нуль-

Состав горючей смеси
Composition of the combustible mixture

№	Компонент		Молярный вес, г/моль
1	Водяной пар	H ₂ O	18.0152
2	Гидроксил	ОН	17.0073
3	Атомарный водород	H	1.0079
4	Атомарный кислород	O	15.9994
5	Пергидроксил	HO ₂	33.0067
6	Перекись водорода	H ₂ O ₂	34.0146
7	Водород	H ₂	2.0158
8	Кислород	O ₂	31.9988
9	Азот	N ₂	28.0134

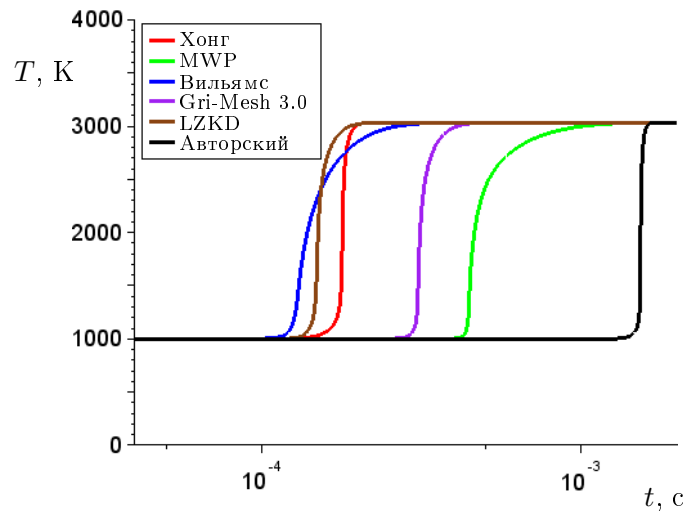


Рис. 1. Скорость выхода температуры на состояние равновесия для различных кинетических механизмов. Начальные условия: $T_0 = 1000$ К, $P_0 = 1$ бар; $[H_2] : [O_2] : [N_2] = 2 : 1 : 4$

Fig. 1. The rate of reaching the temperature equilibrium state for various kinetic mechanisms. Initial conditions: $T_0 = 1000$ К, $P_0 = 1$ бар; $[H_2] : [O_2] : [N_2] = 2 : 1 : 4$

мерный тест самовоспламенения проводился заданием начальной температуры, давления и состава смеси (молярных долей). В условиях отсутствия внешних потоков массы, импульса и энергии реагирующая смесь испытывает превращения компонентов. В горючей смеси через некоторое время реакции станут максимально интенсивными, а температура начнет быстро расти. Момент максимальной интенсивности реакций фиксируется. Время, прошедшее от начального состояния, называется временем задержки самовоспламенения смеси. Это время существенно зависит от начальных значений температуры и давления, как правило, с ростом этих параметров оно уменьшается.

Такой тест позволяет оценить время задержки реакций. Это критический параметр для процессов горения и детонации: он определяет скорость горения и устойчивость процесса детонации. Из рис. 1 видно, что в этих условиях время задержки реакции для различных механизмов может различаться на порядок. Кроме того, скорость выхода температуры на равновесную для разных механизмов различная. Поскольку равновесное состояние определяется лишь термодинамикой участвующих компонентов и начальным состоянием смеси, конечная температура для всех механизмов одна и та же. Во всех исследуемых в работе механизмах восемь активных компонентов и нейтральный азот. Все механизмы имеют цепную природу, и задержка самовоспламенения обусловлена прежде всего накоплением активных радикалов до некоторого критического уровня. Наименьшая задержка реакций отмечена у механизма Вильямса, далее следуют механизмы Ли–Джоу–Казакова–Драера (LZKD), Хонга, Gri-Mech 3.0, Маса–Варнаца–Поупа (MWP), затем авторский. Выход же на равновесное состояние происходит в ином порядке: сначала LZKD и механизм Хонга, затем Вильямса, Gri-Mech 3.0, MWP и авторский. Самый резкий подъем температуры у механизмов Хонга и авторского, самый плавный — у MWP.

4. Верификация и валидация

Выполнялось тестирование программного кода для авторского кинетического механизма путем сравнения с экспериментальными данными [34, 35]. Проводилось моделирова-

ние процессов, протекающих в измерительной секции ударной трубы (рис. 2), которая заполнена покоящейся стехиометрической водородно-воздушной смесью с молярными долями компонентов $C_{H_2} : C_{O_2} : C_{N_2} = 2 : 1 : 3.76$. В измерительной секции установлены шесть высокоточных датчиков давления, в нижней части трубы расположены ионизационные датчики. Исследовались процессы, протекающие в результате отражения и фокусировки ударных волн. Методика проведения экспериментов детально изложена в [36, 37].

Осциллограммы давлений для одного из экспериментов по отражению ударной вол-

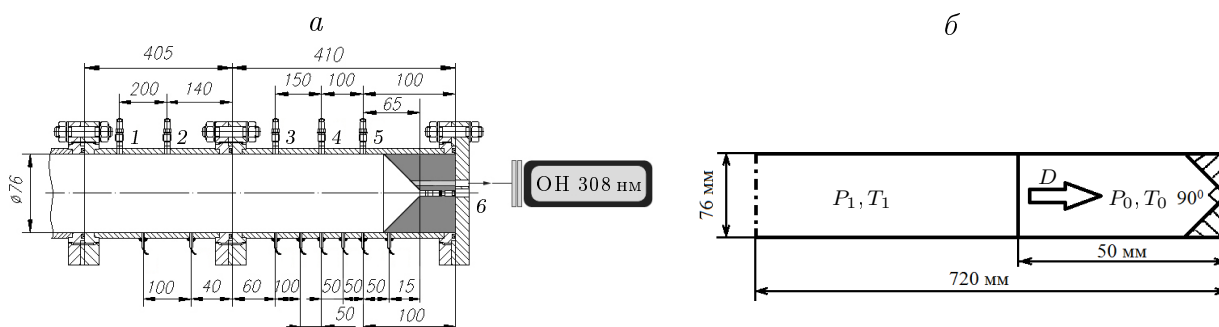


Рис. 2. Схема измерительной секции ударной трубы в камере сгорания детонационного двигателя (а). Размеры даны в миллиметрах. 1–6 — датчики давления. Схема задачи (б), где сечение, проведенное через центр цилиндрической трубы, параллельно боковой грани клинообразной вставки

Fig. 2. a — diagram of the measuring section for the jet tube of the combustion chamber of detonation engine. All distances are in millimeters. б — diagram of the considered problem. Plane section along the axis of the cylindrical pipe is parallel to the side face of the wedge-shaped insertion

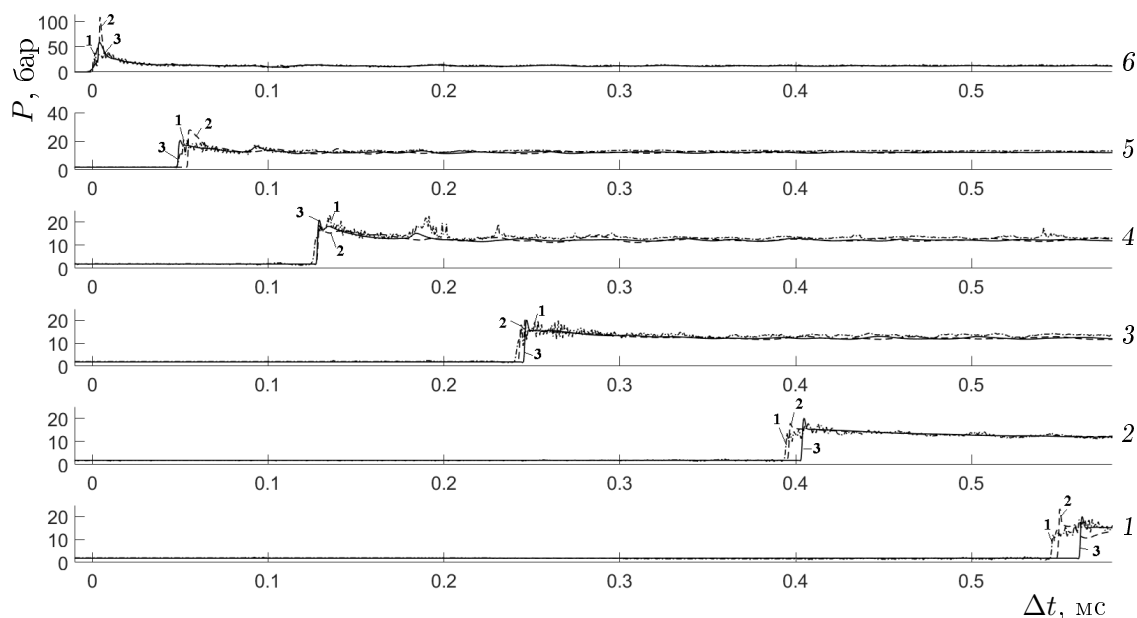


Рис. 3. Зависимость давления в измерительной секции ударной трубы от времени: цифра 1, штрихпунктирная линия — эксперимент; цифра 2, штриховая линия — численная схема 1; цифра 3, непрерывная линия — численная схема 2. 1–6 — датчики

Fig. 3. Time dependence versus pressure in the measuring section of the jet tube: number 1, dash-dotted line — experiment; number 2, dashed line — numerical scheme 1, number 3, solid line — numerical scheme 2. 1–6 — sensors

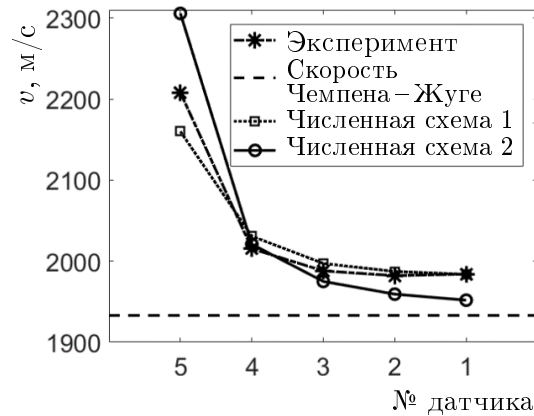


Рис. 4. Скорость распространения ударной волны в камере сгорания детонационного двигателя
Fig. 4. Propagation velocity of the shock wave in the combustion chamber of detonation engine

ны от закрытого торца с клинообразной вставкой для шести датчиков, а также диаграммы давление – время, полученные из численных экспериментов с использованием схем 1 и 2 [36, 37], представлены на рис. 3. Для данного случая на рис. 4 приведены графики скоростей распространения детонационной волны для эксперимента, двух численных схем и теоретическое значение скорости детонации Чепмена – Жуге. Результат, полученный с применением схемы 1, учитывающей все эффекты, превышает теоретическое значение и практически совпадает с экспериментальными данными. Схема 1 используется далее в статье.

Модификации, которые авторы внесли в механизм Мааса – Варнаца – Поупа, позволили добиться того, что при его использовании результаты, полученные при прямом возбуждении детонации при фокусировке ударных волн и в случае возбуждения горения с последующим переходом к детонации, совпали с результатами экспериментов с достаточно хорошей точностью. Сам оригинальный механизм Мааса – Варнаца – Поупа таких результатов не давал.

5. Тестовая задача

В качестве тестовой задачи была рассмотрена камера сгорания детонационного двигателя, которая представляет собой коаксиальный цилиндр с внутренним цилиндрическим телом, заканчивающимся конусом (рис. 5). Подача топлива осуществлялась из торцевых инжекторов (в соотношении $[H_2] : [O_2] = 3 : 1$, давление и температура в баллонах соответственно 15 бар и 258 К) и из инжекторов, расположенных на внутренней и внешней стенках камеры сгорания, подавалась богатая смесь (давление и температура в баллонах 10 бар и 258 К). В начальный момент времени камера заполнена воздухом с давлением 1 бар и температурой 300 К. Зажигание осуществлялось подводом энергии мощностью $Q = 20 \text{ кВт/см}^3$ в область шарообразной формы радиусом $r_{ign} = 2.5 \text{ мм}$ в течение первых $t_{ign} = 10^{-6} \text{ с}$ после начала процесса. Длина и радиус рабочей области $L = 10 \text{ см}$ и $R = 5 \text{ см}$, радиус внутреннего тела $R_b = 3 \text{ см}$, длина внутреннего тела без завершающего конуса $L_b = 3 \text{ см}$, высота завершающего конуса $L_c = 3 \text{ см}$, число торцевых инжекторов 72, их радиус 0.2 см, число инжекторов на внутренней и внешней стенках соответственно равно 24 и 28, их радиус 0.15 см. Геометрия камеры сгорания представлена на рис. 5.

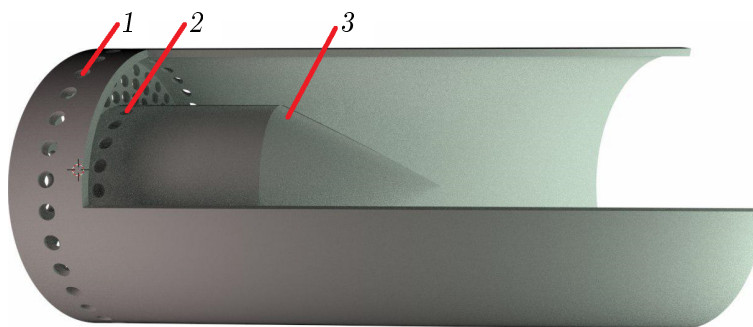


Рис. 5. Геометрия камеры сгорания: 1 — форсунки на наружных стенках, 2 — форсунки на внутренней стенке, 3 — внутреннее тело

Fig. 5. Combustion chamber geometry: 1 — nozzles on the outer walls, 2 — nozzles on the inner wall, 3 — inner body

Для рассмотренной конфигурации камеры расчетная область $N = [200, 100, 100]$, число активных ячеек 1 176 012. Расчет процессов в камере сгорания производился на вычислительной системе с двумя процессорами Intel Xeon (R) CPU E5-6550 2 ГГц, среднее время расчета до 1000 мкс составило около четырех суток.

6. Результаты

Распределение давления в момент времени 100 мкс для различных кинетических механизмов представлено на рис. 6, *a*. Видно, что волновая картина в камере для разных кинетических механизмов различная. В случаях с механизмами Хонга и Gri-Mech 3.0 в момент времени 100 мкс создается дополнительная детонация за счет более интенсивных колебаний и горение переходит в детонацию. В остальных четырех механизмах в рассматриваемый момент времени детонация происходит в одномодовом режиме, но с различной скоростью распространения детонационной волны. Распределение температуры для случаев с различными кинетическими механизмами в момент времени 100 мкс представлено на рис. 6, *b*. За счет реакции диссоциации среднее значение температуры в камере не превышает 1500 К для всех рассмотренных случаев. В нижней части камеры за счет подачи свежей смеси из инжекторной системы температура понижена. Шлейф детонационной волны можно наблюдать в области повышенной температуры, где скопились продукты детонации, которые не дошли до выхода из камеры.

На рис. 7 представлено распределение концентрации молярного водорода и кислорода для различных кинетических механизмов в момент времени 100 мкс. На распределении, приведенном на рис. 7, *a*, можно определить позицию детонационной волны. Здесь, как и при распределении давления, можно наблюдать значительные различия как в скоростях детонации, так и в наличии дополнительных взрывов. В некоторых механизмах волна продвинулась дальше за счет большей скорости детонационной волны (механизм Ли–Джоу–Казакова–Драера), наблюдается недостаточное прогорание водорода, что характерно для данной конфигурации камеры и подачи богатой смеси. Из рис. 7, *b* можно заметить, что после прохождения детонационной волны кислород практически полностью расходуется, наблюдаются области с незначительным остатком окислителя, который в дальнейшем исчезает за счет дожигания излишков водорода.

Изменение тяги в камере сгорания в зависимости от времени приведено на рис. 8. Несмотря на небольшие различия в скоростях детонации, средние значения тяги различаются незначительно: для механизма Хонга оно составляет 1502 Н, для механизма Ли – Джоу – Казакова – Драера – 1477 Н, Мааса – Варнаца – Поупа – 1469 Н, для авторского – 1540 Н, для механизма Вильямса – 1443 Н, Gri-Mech 3.0 – 1441 Н. Если же сравнивать значения удельного импульса, то отличия для рассмотренных кинетических механизмов более явные, так как возникающие волновые конфигурации приводят к существенным различиям в расходе горючего, а это существенно влияет на удельный импульс.

Зависимость расхода горючего водорода от времени представлена на рис. 9. Для рассматриваемой конфигурации камеры средний расход горючего максимален для кинетических механизмов Ли – Джоу – Казакова – Драера, Хонга и авторского и составляет 170 г/с, для случая Мааса – Варнаца – Поупа и Вильямса он равен 160 г/с, минимальный расход наблюдается для механизма Gri-Mech 3.0, он равен 130 г/с.

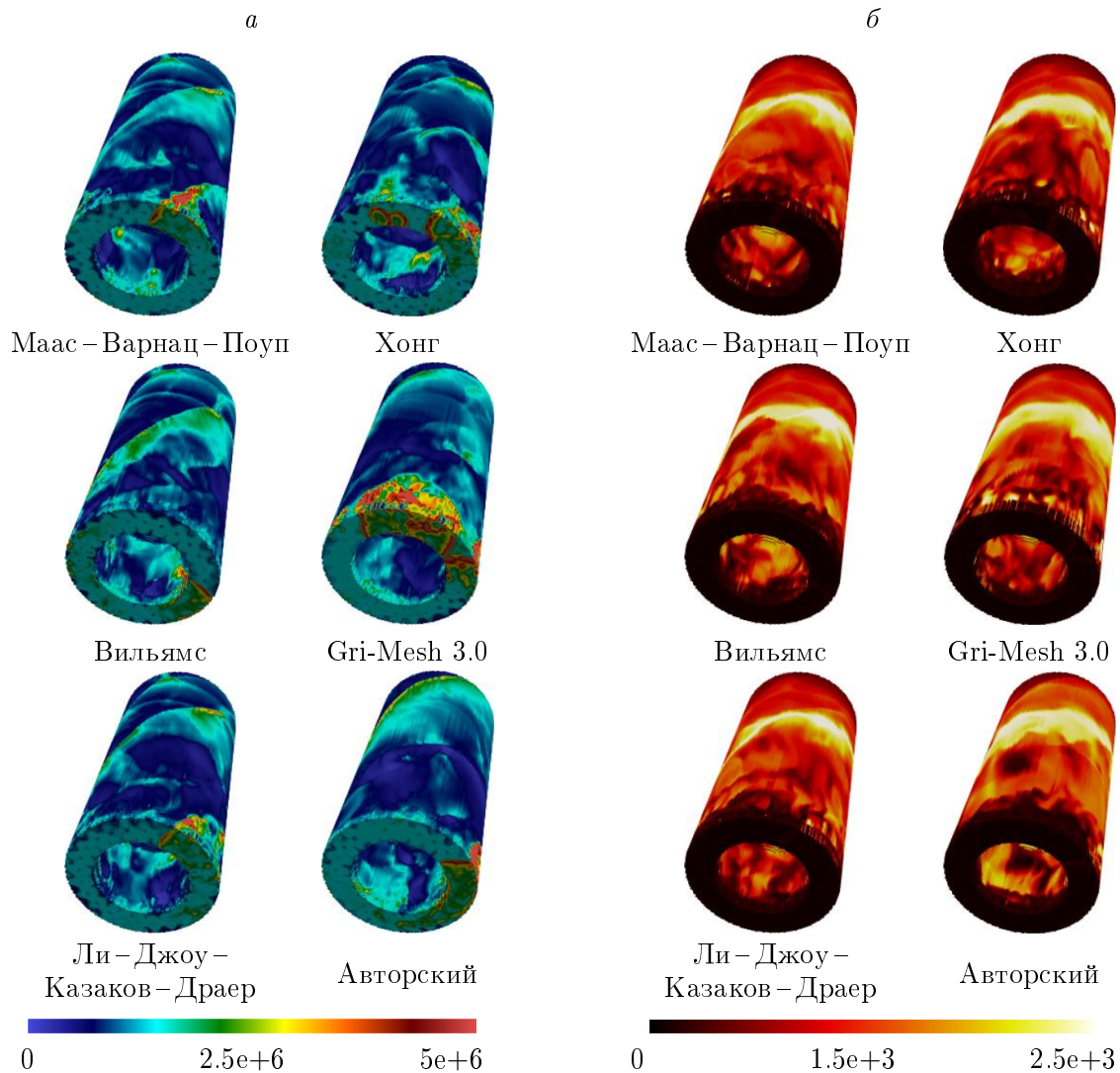


Рис. 6. Распределение давления (а) и температуры (б) в камере сгорания в момент времени 100 мкс для богатой смеси и различных кинетических механизмов

Fig. 6. Pressure distribution (а) and temperature (б) in the combustion chamber at 100 μ s for both rich mixture and for various kinetic mechanisms

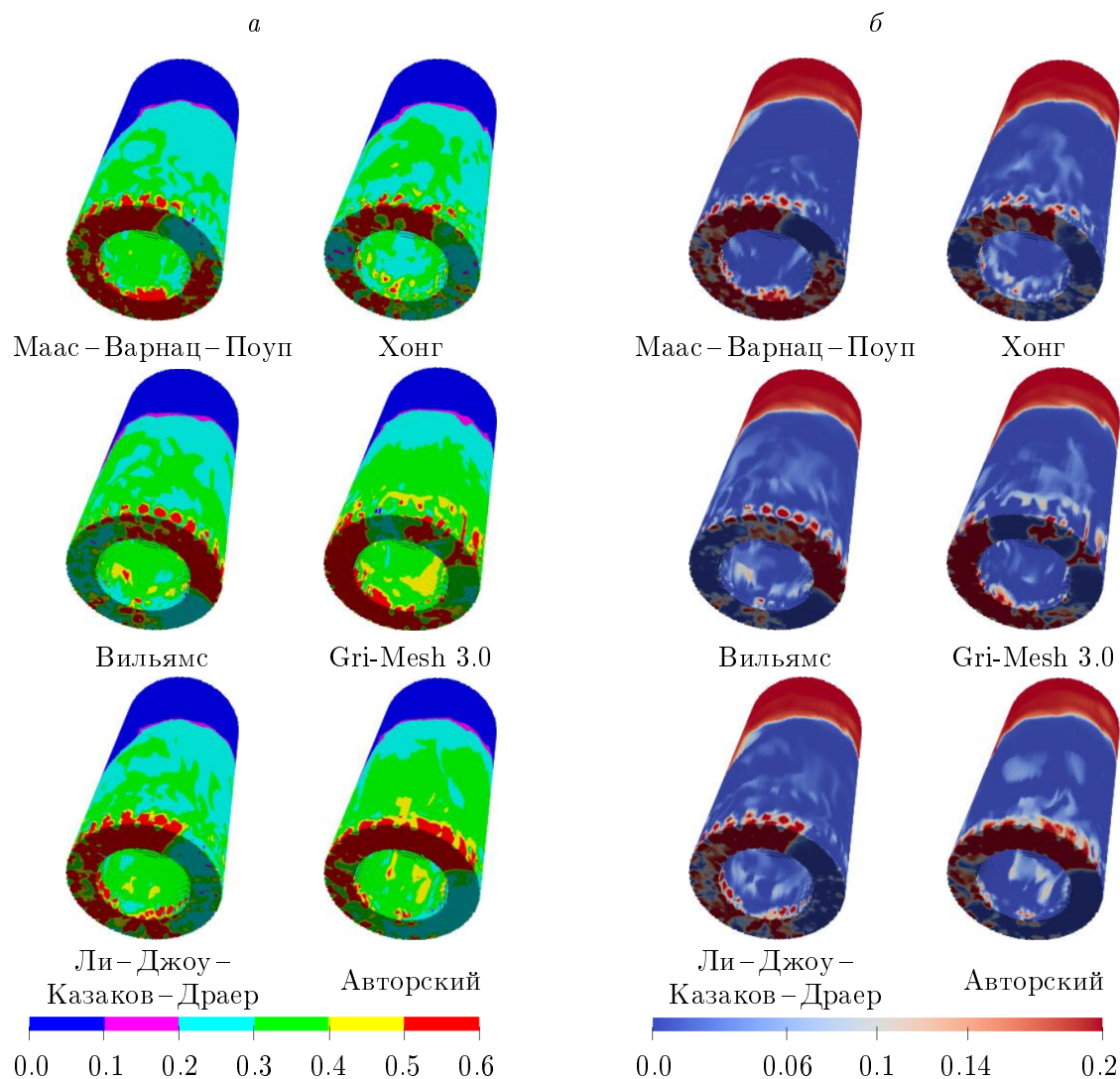


Рис. 7. Распределение концентрации водорода (а) и кислорода (б) в камере сгорания в момент времени 100 мкс для богатой смеси и различных кинетических механизмов
 Fig. 7. Distribution of molar concentration for hydrogen (a) and oxygen (b) in the combustion chamber at 100 μ s for both rich mixture and for various kinetic mechanisms

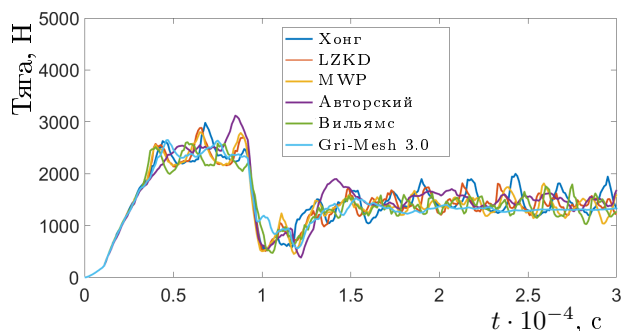


Рис. 8. График изменения тяги в камере сгорания детонационного двигателя во времени
 Fig. 8. Diagram of thrust variation in the combustion chamber over time

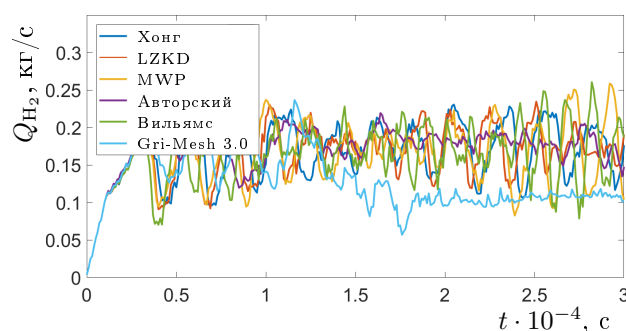


Рис. 9. Зависимость расхода горючего в камере сгорания от времени
 Fig. 9. Time dependence of fuel consumption in the combustion chamber

Выводы

Написан авторский код, позволяющий моделировать физические процессы многокомпонентной газовой динамики с химическими превращениями и турбулентными эффектами. Форма домена, начальные и граничные условия определялись пользователем. Программа может работать в различных режимах, связанных с режимами расчета: создание сетки, настройка начального состояния, обработка результатов расчетов. Программа написана на языке C стандарта ISO 90 и может быть запущена на различных системах, включая суперкомпьютер (расчеты в параллельном режиме).

С помощью разработанной программы проведен ряд вычислительных экспериментов. Получены параметры, при которых в камере сгорания детонационного двигателя существует стабильная самоподдерживающаяся детонационная волна. Получены расчетные тяговые характеристики.

Выполнено моделирование камеры сгорания двигателя для различных кинетических механизмов, описывающих химические превращения с помощью элементарных реакций, один из этих механизмов является собственной разработкой авторов. Получено, что решение полной задачи с учетом турбулентности, диффузии и химических превращений в трехмерной постановке в значительной степени зависит от выбора элементарного кинетического механизма.

Получено, что при использовании богатой смеси водород – кислород скорость детонации Чепмена – Жуге 3.17 км/с. Для авторского кинетического механизма эта величина составила 3.22 км/с.

Достоверность рассмотренных кинетических механизмов в целом нельзя определить однозначно, поскольку надежные экспериментальные данные по временам задержки имеются лишь в узком диапазоне температур и давлений и вне такого диапазона расчетные данные для разных механизмов могут сильно различаться. Во-вторых, многие механизмы рассчитаны лишь на определенный диапазон давлений и вне диапазона их использование дает лишь экстраполяцию. В-третьих, отдельные реакции из механизмов могут иметь ограниченный диапазон надежности данных, получить которые опытным путем крайне затруднительно. В связи с этим при выборе кинетического механизма реакции необходимо ориентироваться на соотнесение полученных численных результатов с опытными данными для конкретной конфигурации двигателя.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-07-00889).

Список литературы

- [1] **Wolanski P.** Detonative propulsion. Proceedings of the Combustion Institute. 2013; (34):125–158.
- [2] **Zeldovich Y.B.** On the use of detonative combustion in power engineering. Journal of Technical Physics. 1940; (10):1453–1461.
- [3] **Nicholls J.A., Wilkinson H.R., Morrison R.B.** Intermittent detonation as a thrust producing mechanism. Journal of Jet Propulsion. 1957; 27(5):534–541.
- [4] **Voitsekhovskii B.V.** Steady detonation. Doklady Akademii Nauk SSSR. 1959; 129(6):1254–1256.

- [5] **Voitsekhovskii B.V., Mitrofanov V.V., Topchiyan M.E.** Detonation-front structure in gases. Novosibirsk: Izдание Sibirskogo Otdyeleniya Akademyi Nauk SSSR; 1963: 168.
- [6] **Anand V., Gutmark E.** Rotating detonation combustors and their similarities to rocket instabilities. *Progress in Energy and Combustion Science*. 2019; (73):182–234.
- [7] **Bykovskii F.A., Zhdan S.A., Vedernikov E.F.** Continuous spin detonation in annular combustors. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. 2005; 41(4):449–459.
- [8] **Kindracki J., Kobiera A., Wolanski P., Gut Z., Folusiak M., Swiderski K.** Experimental and numerical study of the rotating detonation engine in hydrogen–air mixtures. *Progress in Propulsion Physics*. 2011; (2):555–582.
- [9] **Frolov S.M., Dubrovskii A.V., Ivanov V.S.** Three-dimensional numerical simulation of operation process in rotating detonation engine. *Progress in Propulsion Physics*. 2013; (4):467–488.
- [10] **Zhenhua P., Baochun F., Xudong Z., Mingyue G., Gang D.** Wavelet pattern and self-sustained mechanism of gaseous detonation rotating in a coaxial cylinder. *Combustion and Flame*. 2011; (158):2220–2228.
- [11] **George A.St., Driscoll R., Anand V., Gutmark E.** On the existence and multiplicity of rotating detonations. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2017; (36):2691–2698.
- [12] **Tang X., Wang J., Shao Y.** Three-dimensional numerical investigations of the rotating detonation engine with a hollow combustor. *Combustion and Flame*. 2015; (162):997–1008.
- [13] **Sun J., Zhou J., Liu S., Lin Z., Lin W.** Numerical investigation of a non-premixed hollow rotating detonation engine. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2019; (44):17084–17094.
- [14] **Bykovskii F.A., Mitrofanov V.V., Vedernikov E.F.** Continuous detonation combustion of fuel–air mixtures. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. 1997; (33):344–353.
- [15] **Bykovskii F.A., Vedernikov E.F., Zholobov Y.A.** Detonation combustion of lignite with titanium dioxide and water additives in air. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. 2017; (53):453–460.
- [16] **Nakagami S., Matsuoka K., Kasahara J., Kumazawa Y., Fujii J., Matsuo A.** Experimental visualization of the structure of rotating detonation waves in a disk-shaped combustor. *Journal of Propulsion and Power*. 2016; (33):80–88.
- [17] **Wen H., Xie Q., Wang B.** Propagation behaviors of rotating detonation in an obround combustor. *Combustion and Flame*. 2019; (210):389–398.
- [18] **Levin V.A., Manuylovich I.S., Markov V.V.** Rotating detonation wave in an annular gap. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*. 2018; 300(1):126–136.
- [19] **Nikitin F., Filippov Y., Stamov L., Mikhilchenko E.** 3D problems of rotating detonation wave in a ramjet engine modeled on a supercomputer. *Supercomputing Frontiers and Innovations*. 2018; 5(2):76–85.
- [20] **Wilcox D.C.** Turbulence modeling for CFD. California: DCW Industries, Inc. La Canada; 1994: 460.
- [21] **Liou M.-S.** A sequel to AUSM: AUSM+. *Journal of Computational Physics*. 1996; (129):364–382.

- [22] **van Leer B.** Towards the ultimate conservative difference scheme V. A second-order sequel to Godunov's method. *Journal of Computational Physics*. 1979; 32(1):101–136. DOI:10.1016/0021-9991(79)90145-1.
- [23] **Launder B.E., Spalding D.B.** The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 1974; (3):269–289.
- [24] **Kader B.A.** Temperature and concentration profiles in fully turbulent boundary layers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 1981; (24):1541–1544.
- [25] **Bredberg J.** On the wall boundary condition for turbulence models. Internal Report 00/4. Göteborg, Sweden: Department of Thermo and Fluid Dynamics Chalmers University of Technology; 2000: 25. Available at: http://www.tfd.chalmers.se/~lada/postscript_files/jonas_report_WF.pdf (Accessed 06.12.2020).
- [26] **Popovac M., Hanjalic K.** Compound wall treatment for RANS computation of complex turbulent flows and heat transfer. *Flow Turbulence Combustion*. 2007; (78):177–202.
- [27] **Maas U., Pope S.B.** Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combustion and Flame*. 1992; (88):239–264.
- [28] **Hong Z., Cook R.D., Davidson D.F., Hanson R.K.** A shock tube study of $\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$ and $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightarrow 2\text{OH} + \text{M}$ using laser absorption of H_2O and OH : Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Journal of Physical Chemistry A*. 2010; 114(18):5718–5727. Available at: <http://dx.doi.org/10.1021/jp100204z>
- [29] **Williams F.A.** Short chemical mechanisms for deflagrations and detonations. Proceedings of the Western States Section Combustion Institute Spring Meeting, 29–30 March, 2004. Davis: University of California; 2004: 04S-1.
- [30] GRI-Mech version 3.0 7/30/99. CHEMKIN-II format. Available at: <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech> (Accessed 06.12.2020).
- [31] **Li J., Zhao Z.W., Kazakov A., Dryer F.L.** An updatived comprehensive kinetic model of hydrogen combustion. *International Journal of Chemical Kinetics*. 2004; (36):566–575.
- [32] **Smirnov N.N., Nikitin V.F., Stamov L.I., Mikhalchenko E.V., Tyurenkova V.V.** Three-dimensional modelling of rotating detonation in a ramjet engine. *Acta Astronautica*. 2019; 163(Part A):168–176. DOI:10.1016/j.actaastro.2019.02.016.
- [33] **Новиков Е.А.** Исследование $(m, 2)$ -методов решения жестких систем. *Вычислительные технологии*. 2007; 12(5):103–115.
- [34] **Smirnov N.N., Penyazkov O.G., Sevrouk K.L., Nikitin V.F., Stamov L.I., Tyurenkova V.V.** Onset of detonation in hydrogen – air mixtures due to shock wave reflection inside a combustion chamber. *Acta Astronautica*. 2018; (149):77–92.
- [35] **Стамов Л.И.** Вычислительное моделирование отражения и фокусировки ударных волн в клинообразной полости в химически реагирующем газе. *Вестник кибернетики*. 2018; 32(4):85–94.
- [36] **Martynenko V.V., Penyazkov O.G., Ragotner K.A., Shabunya S.I.** High-temperature ignition of hydrogen and air at high pressures downstream of the reflected shock wave. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 2004; 77(4):785–793.
- [37] **Penyazkov O.G., Ragotner K.A., Dean A.J., Varatharajan B.** Autoignition of propane – air mixtures behind reflected shock waves. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2005; 30(2):1941–1947.
-

MATHEMATICAL MODELLING

DOI:10.25743/ICT.2021.26.1.003

Modelling of a rotating detonation engine combustion chamberMIKHALCHENKO ELENA V.^{1,2,*}, NIKITIN VALERIY F.^{1,2}, STAMOV LYUBEN I.^{1,2}, FILIPPOV YURIY G.¹¹Moscow Lomonosov State University, Moscow, 119992, Russia²Scientific and Research Institute for System Analysis of RAS, Moscow, 117218, Russia*Corresponding author: Mikhalchenko Elena V., e-mail: MikhalchenkoLena@yandex.ru

Received December 20, 2019, revised September 25, 2020, accepted October 19, 2020

Abstract

Purpose. To create software for studying the features of the transition from ignition and deflagration to a detonation mode in a three-dimensional configuration, including the formation and propagation of a rotating detonation complex, which takes transient processes into account.

Methodology. The software is based on a mathematical model for multi-component gas dynamics with chemical reactions and turbulent transport for diffusion, viscosity, and thermal conductivity. High-order calculation schemes are used. To solve a stiff subsystem of kinetic equations, a hybrid implicit-explicit Novikov method is used (a specific variant of a Rosenbrock method).

Findings. Authors created a code which calculates physical processes within a multi-component gas dynamics paradigm. The code accounts for chemical processes and turbulence modelling. The shape of computation domain and the type of boundary conditions is user defined. These include boundary conditions at the wall, as well as inflow and outflow conditions for both subsonic, and supersonic modes. Initial conditions can be set up differently in different regions of the domain. The software consists of several modules: a mesh-building module, initial state creation, calculation of new time layers saving the intermediate and final results at control points with a possibility to resume interrupted calculations, and post-processing modules.

Authors developed blocks of solutions for various elementary chemical kinetic mechanisms, one of considered mechanisms is build up by themselves, others are published previously. It was obtained that the details of the 3D transient problem solution significantly depend on the chosen mechanism.

Originality/value. The software complex makes it possible to process numerical modelling of a detonation engine combustion chamber in a 3D configuration considering chemical reactions and turbulent transport. Different chemical kinetics mechanisms are utilizable, and thrust characteristics could be obtained.

Keywords: mathematical modelling, detonation, deflagration, engine with a rotating detonation wave, chemical kinetics.

Citation: Mikhalchenko E.V., Nikitin V.F., Stamov L.I., Filippov Yu.G. Modelling of a rotating detonation engine combustion chamber. Computational Technologies. 2021; 26(1):33–49. DOI:10.25743/ICT.2021.26.1.003. (In Russ.)

Acknowledgements. Russian Foundation for Basic Research (project code 18-07-00889) is acknowledged for financial support.

References

1. **Wolanski P.** Detonative propulsion. Proceedings of the Combustion Institute. 2013; (34):125–158.
2. **Zeldovich Y.B.** On the use of detonative combustion in power engineering. Journal of Technical Physics. 1940; (10):1453–1461.

3. **Nicholls J.A., Wilkinson H.R., Morrison R.B.** Intermittent detonation as a thrust producing mechanism. *Journal of Jet Propulsion*. 1957; 27(5):534–541.
4. **Voitsekhovskii B.V.** Steady detonation. *Doklady Akademii Nauk SSSR*. 1959; 129(6):1254–1256.
5. **Voitsekhovskii B.V., Mitrofanov V.V., Topchiyan M.E.** Detonation-front structure in gases. Novosibirsk: Izdanie Sibirskogo Otdyeleniya Akademyi Nauk SSSR; 1963: 168.
6. **Anand V., Gutmark E.** Rotating detonation combustors and their similarities to rocket instabilities. *Progress in Energy and Combustion Science*. 2019; (73):182–234.
7. **Bykovskii F.A., Zhdan S.A., Vedernikov E.F.** Continuous spin detonation in annular combustors. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. 2005; 41(4):449–459.
8. **Kindracki J., Kobiera A., Wolanski P., Gut Z., Folusiak M., Swiderski K.** Experimental and numerical study of the rotating detonation engine in hydrogen–air mixtures. *Progress in Propulsion Physics*. 2011; (2):555–582.
9. **Frolov S.M., Dubrovskii A.V., Ivanov V.S.** Three-dimensional numerical simulation of operation process in rotating detonation engine. *Progress in Propulsion Physics*. 2013; (4):467–488.
10. **Zhenhua P., Baochun F., Xudong Z., Mingyue G., Gang D.** Wavelet pattern and self-sustained mechanism of gaseous detonation rotating in a coaxial cylinder. *Combustion and Flame*. 2011; (158):2220–2228.
11. **George A.St., Driscoll R., Anand V., Gutmark E.** On the existence and multiplicity of rotating detonations. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2017; (36):2691–2698.
12. **Tang X., Wang J., Shao Y.** Three-dimensional numerical investigations of the rotating detonation engine with a hollow combustor. *Combustion and Flame*. 2015; (162):997–1008.
13. **Sun J., Zhou J., Liu S., Lin Z., Lin W.** Numerical investigation of a non-premixed hollow rotating detonation engine. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2019; (44):17084–17094.
14. **Bykovskii F.A., Mitrofanov V.V., Vedernikov E.F.** Continuous detonation combustion of fuel–air mixtures. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. 1997; (33):344–353.
15. **Bykovskii F.A., Vedernikov E.F., Zholobov Y.A.** Detonation combustion of lignite with titanium dioxide and water additives in air. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. 2017; (53):453–460.
16. **Nakagami S., Matsuoka K., Kasahara J., Kumazawa Y., Fujii J., Matsuo A.** Experimental visualization of the structure of rotating detonation waves in a disk-shaped combustor. *Journal of Propulsion and Power*. 2016; (33):80–88.
17. **Wen H., Xie Q., Wang B.** Propagation behaviors of rotating detonation in an obround combustor. *Combustion and Flame*. 2019; (210):389–398.
18. **Levin V.A., Manuylovich I.S., Markov V.V.** Rotating detonation wave in an annular gap. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*. 2018; 300(1):126–136.
19. **Nikitin F., Filippov Y., Stamov L., Mikhailchenko E.** 3D problems of rotating detonation wave in a ramjet engine modeled on a supercomputer. *Supercomputing Frontiers and Innovations*. 2018; 5(2):76–85.
20. **Wilcox D.C.** Turbulence modeling for CFD. California: DCW Industries, Inc. La Canada; 1994: 460.
21. **Liou M.-S.** A sequel to AUSM: AUSM+. *Journal of Computational Physics*. 1996; (129):364–382.
22. **van Leer B.** Towards the ultimate conservative difference scheme V. A second-order sequel to Godunov’s method. *Journal of Computational Physics*. 1979; 32(1):101–136. DOI:10.1016/0021-9991(79)90145-1.
23. **Launder B.E., Spalding D.B.** The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 1974; (3):269–289.
24. **Kader B.A.** Temperature and concentration profiles in fully turbulent boundary layers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 1981; (24):1541–1544.
25. **Bredberg J.** On the wall boundary condition for turbulence models. Internal Report 00/4. Göteborg, Sweden: Department of Thermo and Fluid Dynamics Chalmers University of Technology; 2000: 25. Available at: http://www.tfd.chalmers.se/~simlada/postscript_files/jonas_report_WF.pdf (Accessed 06.12.2020).
26. **Popovac M., Hanjalic K.** Compound wall treatment for RANS computation of complex turbulent flows and heat transfer. *Flow Turbulence Combustion*. 2007; (78):177–202.
27. **Maas U., Pope S.B.** Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combustion and Flame*. 1992; (88):239–264.

28. **Hong Z., Cook R.D., Davidson D.F., Hanson R.K.** A shock tube study of $\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$ and $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightarrow 2\text{OH} + \text{M}$ using laser absorption of H_2O and OH : Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Journal of Physical Chemistry A*. 2010; 114(18):5718–5727. Available at: <http://dx.doi.org/10.1021/jp100204z>
29. **Williams F.A.** Short chemical mechanisms for deflagrations and detonations. Proceedings of the Western States Section Combustion Institute Spring Meeting, 29–30 March, 2004. Davis: University of California; 2004: 04S-1.
30. GRI-Mech version 3.0 7/30/99. CHEMKIN-II format. Available at: <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech> (Accessed 06.12.2020).
31. **Li J., Zhao Z.W., Kazakov A., Dryer F.L.** An updatived comprehensive kinetic model of hydrogen combustion. *International Journal of Chemical Kinetics*. 2004; (36):566–575.
32. **Smirnov N.N., Nikitin V.F., Stamov L.I., Mikhailchenko E.V., Tyurenkova V.V.** Three-dimensional modeling of rotating detonation in a ramjet engine. *Acta Astronautica*. 2019; 163(Part A):168–176. DOI:10.1016/j.actaastro.2019.02.016.
33. **Novikov E.A.** A study of $(m, 2)$ -methods for stiff systems. *Computational Technologies*. 2007; 12(5):103–115. (In Russ.)
34. **Smirnov N.N., Penyazkov O.G., Sevrouk K.L., Nikitin V.F., Stamov L.I., Tyurenkova V.V.** Onset of detonation in hydrogen–air mixtures due to shock wave reflection inside a combustion chamber. *Acta Astronautica*. 2018; (149):77–92.
35. **Stamov L.** Numerical simulation of shock waves reflection and focusing inside a wedge in chemically reacting gas mixture. *Proceeding in Cybernetics*. 2018; (4):85–94. (In Russ.)
36. **Martynenko V.V., Penyazkov O.G., Ragotner K.A., Shabunya S.I.** High-temperature ignition of hydrogen and air at high pressures downstream of the reflected shock wave. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 2004; 77(4):785–793.
37. **Penyazkov O.G., Ragotner K.A., Dean A.J., Varatharajan B.** Autoignition of propane–air mixtures behind reflected shock waves. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2005; 30(2):1941–1947.