УДК 533.6.697; 662.61

**А. Е. ДЕШКО**

# О ВЫБОРЕ КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ГОРЕНИЯ ВОДОРОДА ПРИ ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ СВЕРХЗВУКОВОГО НЕРАВНОВЕСНОГО ТЕЧЕНИЯ

В рамках стационарных уравнений вязкого слоя с использованием маршевого алгоритма проведено численное моделирование неравновесного истечения сверхзвуковой воздушно-водородной струи в спутный сверхзвуковой поток в осесимметричном канале переменного сечения. Целью исследований является выбор рациональной кинетической модели окисления водорода в кислороде воздуха, позволяющей определить основные термогазодинамические параметры турбулентного неравновесного течения в канале при минимальных затратах вычислительных ресурсов. Рассмотрены кинетические схемы, описывающие процесс окисления водорода в кислороде воздухе в рамках 8 – 9 химических реакций. Выполнено предварительное тестирование рассмотренных схем в рамках модели идеального реактора. Выбор рациональной кинетической модели горения водорода при сверхзвуковом неравновесном течении в канале обоснован на основании сравнения с экспериментальными данными. Исследовано влияние содержания паров воды на величину периода индукции. Показано, что добавление паров воды приводит к уменьшению задержки воспламенения водорода. В результате проведенных исследований установлено, что кинетическая модель горения водорода, включающая 9 химических реакций, позволяет адекватно определить период индукции и величину тепловыделения в процессе горения в сверхзвуковом потоке. Точность задания начального компонентного состава неравновесной газовой смеси существенно влияет на величину периода индукции.

У рамках стаціонарних рівнянь в’язкого шару з використанням маршового алгоритму проведено чисельне моделювання нерівноважного витікання надзвукового повітряно-водневого струменя в супутний надзвуковий потік у вісесиметричному каналі змінного перетину. Метою досліджень є вибір раціональної кінетичної моделі окислювання водню в кисні повітря, яка дозволяє визначити основні термогазодинамічні параметри турбулентної нерівноважної течії в каналі при мінімальних витратах обчислювальних ресурсів. Розглянуто кінетичні схеми, що описують процес окислювання водню в рамках 8 – 9 хімічних реакцій. Виконано попереднє тестування розглянутих схем у рамках моделі ідеального реактора. Вибір раціональної кінетичної моделі горіння водню при надзвуковій нерівноважній течії в каналі обґрунтовано на підставі порівняння із експериментальними даними. Досліджено вплив вмісту парів води на величину періоду індукції. Показано, що додавання парів води приводить до зменшення затримки запалення водню. У результаті проведених досліджень установлено, що кінетична модель горіння водню, що включає 9 хімічних реакцій, дозволяє адекватно визначити період індукції та величину тепловиділення в процесі горіння в надзвуковому потоці. Точність завдання початкового компонентного складу нерівноважної газової суміші істотно впливає на величину періоду індукції.

The non-equilibrium efflux of a supersonic air- hydrogen jet in a supersonic cocurrent flow through axisymmetrical variable-area channel is simulated using a march algorithm in the framework of stationary viscous-layer equations. The research aim is to select a rational kinetic model of hydrogen oxidizing in air oxygen for determination of the basic thermogasdynamic parameters of a turbulent non-equilibrium flow through channel with the minimum of computations. The kinetic models for hydrogen oxidizing in air oxygen in the framework of 8-9 chemical reactions are examined. The considered models are pretested in the framework of the model of an ideal reactor. Selection of a rational kinetic model of hydrogen combustion under the supersonic non-equilibrium flow through channel is grounded on comparison with the experimental data. The effects of water vapour content on the value of the induction period are studied. It is shown that addition of water vapour results in a decrease in delay of oxygen ignition. From the research results it is found that the kinetic model of hydrogen combustion involving 9 chemical reactions allows an adequate determination of the induction period and value of heat generation in the process of combustion through supersonic flow.  The accuracy of setting an initial component content of a non-equilibrium gas mixture affects significantly the value of the induction period.

Организация горения топлива в сверхзвуковом потоке составляет одну из главных проблем создания гиперзвуковых воздушно-реактивных двигателей (ГПВРД). Экспериментальные исследования требуют очень больших материальных затрат; кроме того, возникает ряд трудностей, связанных с необходимостью проведения испытаний с высоким уровнем параметров торможения и обеспечением достоверности результатов вследствие отличия экспериментальных условий от летных. Численное моделирование сверхзвуковых неравновесных газодинамических процессов с учетом детальных механизмов химической кинетики на основе параболизованных уравнений Навье–Стокса, интегрирование которых осуществляется с помощью высокоэкономичных маршевых методов, является актуальным и обоснованным с точки зрения сокращения затрат вычислительных ресурсов, особенно на этапе предварительных расчетов.

Целью работы является выбор адекватной кинетической модели окисления водорода в кислороде воздуха при численном моделировании турбулентного неравновесного течения в канале в рамках модели вязкого слоя.

**Математическая постановка задачи и алгоритм ее решения.**

Рассматривается задача об истечении и горении сверхзвуковой воздушно-водородной струи в спутном сверхзвуковом потоке воздуха в осесимметричном канале переменного поперечного сечения. Для моделирования стационарного развитого турбулентного неравновесного течения в канале используется модель стационарных уравнений вязкого слоя [1] для химически реагирующей газовой смеси. В рамках этой модели течение описывается уравнениями пограничного слоя, дополненными уравнением сохранения поперечного импульса из системы уравнений Эйлера.

Расчетная область представляет собой участок канала между его начальным и конечным сечениями. Нижняя граница области совпадает с осью симметрии канала, а верхняя граница – стенка канала. На левой границе расчетной области, соответствующей входному сечению канала, задаются начальные распределения газодинамических параметров, на нижней границе (оси канала) – условия симметрии течения, на верхней границе (стенке канала) – условия теплоизолированной и непроницаемой стенки. Струя и спутный поток на входе в канал полагаются равномерными за исключением области пограничного слоя на стенке канала. Профили скорости и температуры в пограничном слое во входном сечении задаются в соответствии с распределением на плоской пластине в отсутствие градиента давления [2].

Для расчета характеристик турбулентности используется дифференциальная однопараметрическая модель турбулентности «$\nu_t - 90$» [3]. Расчет проводится численно вдоль основного направления течения в канале маршевым методом. Вследствие «жесткости» уравнений диффузии при протекании химических реакций в основу алгоритма численного расчета на одном шаге по маршевой переменной положен метод расщепления по физическим процессам [4]. На первом шаге расщепления определяется изменение массового состава только за счет химического взаимодействия, в каждом узле расчетной сетки используется неявный многошаговый метод Гира [5]. Для интегрирования уравнений вязкого слоя в отсутствие химического взаимодействия (шаг 2) используется алгоритм, основанный на каскадной неявной схеме решения задачи [6]. Для этого система уравнений, приближенно описывающая течения вязкого газа, разбивается на две подсистемы – подсистему уравнений первого порядка и второго порядка. К первой подсистеме относятся уравнения неразрывности и сохранения поперечной составляющей импульса, которые совместно с уравнением состояния рассматриваются как уравнения относительно давления и поперечной составляющей вектора скорости. Эта подсистема уравнений имеет гиперболический тип. Алгоритм решения этой подсистемы формулируется так, чтобы обеспечить возможность удовлетворения краевым граничным условиям для поперечной компоненты вектора скорости, определяемой из уравнения первого порядка. Ко второй подсистеме относятся уравнения сохранения продольной составляющей импульса, энергии, уравнения переноса компонент, а также уравнения для характеристик турбулентности. Для каждой из подсистем в отдельности постановка задачи Коши является корректной, а решение можно получить, применяя маршевый алгоритм. Для интегрирования каждой подсистемы используются неявные абсолютно устойчивые схемы на основе скалярной прогонки первого порядка аппроксимации по продольной и второго порядка по поперечной переменной.

В силу нелинейности исходной системы уравнений искомое решение на каждом маршевом слое получается в результате последовательных итераций первой и второй подсистем уравнений. Для регуляризации решения в дозвуковых областях в слагаемые, содержащие производную от давления, в уравнениях сохранения продольной и поперечной составляющей импульса и в выражение для полной энтальпии вводится регуляризирующий множитель [7].

**Моделирование химической кинетики**. В литературе имеется значительное количество кинетических моделей, описывающих процесс горения водорода в кислороде или воздухе с различной степенью точности. Эти модели отличаются как количеством используемых химических реакций, так и различными константами скоростей для одних и тех же реакций.

При численном моделировании неравновесного течения результаты расчетов массового состава, теплофизические и термодинамические характеристики продуктов горения газообразного водорода в кислороде воздуха в значительной мере зависят от используемой кинетической модели. Если не говорить о глобальных кинетических моделях, то наиболее простые кинетические схемы, используемые для моделирования процесса горения смеси водород – воздух, включают 8 – 9 реакций. У разных авторов используются именно эти наборы реакций, которые различаются между собой константами скоростей прямых и обратных реакций. Такая кинетическая модель позволяет достаточно точно описать процесс воспламенения водорода, определить период индукции и величину тепловыделения при горении. Схема содержит 7 компонентов $H_2$, $O_2$, H, O, OH, $H_2O$, $N_2$, азот в ней полагается инертным газом.

Были рассмотрены 7 кинетических моделей [8 – 12], отличающиехся, в основном, значениями констант скоростей прямой и обратных реакций. Для предварительного тестирования рассмотренных кинетических схем использовалась модель реактора идеального смешения для среднеобъемных параметров [1]. Согласно данной модели изменение мольных концентраций компонент перемешанной газовой смеси во времени происходит вследствие химических реакций и изменения объема смеси. Рассмотрено изохорическое горение (для процесса при постоянном объеме $V = \text{const}$) водорода в воздухе. Расчеты выполнены при следующих начальных значениях параметров: $P_0$ =0,06 МПа, $T_0 = 900$ К. Начальный массовый состав компонентов $c_{H_2}$ =0,015; $c_{O_2}$ =0,227; $c_{N_2}$ =0,758.

В результате проведенного тестирования выбраны 4 кинетические схемы, которые позволяют получить адекватный результат для заданных термодинамических параметров. В таблице 1 представлены набор реакций и значения коэффициентов скоростей прямых $k'$ и обратных $k''$ реакций для кинетических схем [8 – 10]. Коэффициенты скоростей прямой и обратной реакции определяются в соответствии с законом Аррениуса

$$k = AT^n \exp(-E/RT^*),$$

где $AT^n$ – предэкспоненциальный множитель, который характеризует частоту столкновений реагирующих молекул; $E$ – энергия активации; $R$ – универсальная газовая постоянная; $T^* = T/1000$, К.

Для бинарных реакций размерность коэффициента $k$ – м$^3$/моль·с; для реакций третьего порядка – м$^6$/моль$^2$·с.

На рис. 1 представлены расчетные зависимости температуры изохорической смеси от времени процесса при использовании кинетических моделей 1 – 4. Номера кривых соответствуют номерам кинетических моделей табл. 1.

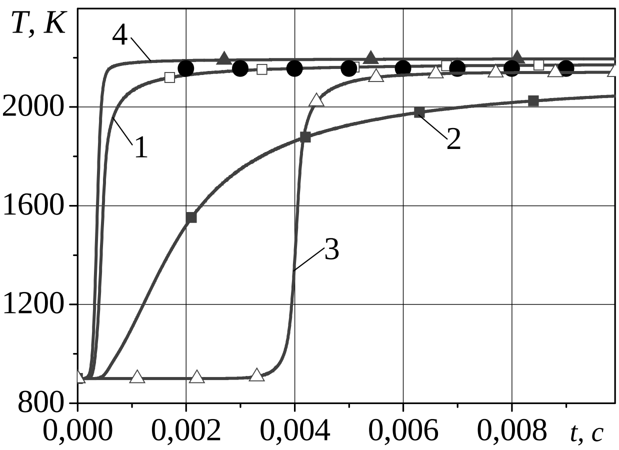


Рис. 1

Значками (●) обозначено значение равновесной температуры смеси при заданных начальных условиях, рассчитанной в предположении равновесного состава. Представленные на рисунке расчетные кривые отличаются временем выхода на равновесный режим, а также величиной температуры при достижении равновесия, которая должна соответствовать равновесной температуре.

Сравнение расчетных значений температуры со значениями равновесной температуры показывает хорошее согласование для кривых, полученных с использованием кинетических моделей 1, 3, 4. Использование модели 2 дает заниженное значение температуры при выходе на равновесный режим. В дальнейших исследованиях модель 4 не рассматривалась, т. к. она близка к модели 1.

Представленные на рисунке результаты позволяют сделать вывод, что выбор кинетической модели горения заметно влияет на расчетные характеристики неравновесной газовой смеси. Одним из тестов, позволяющих определить пригодность той или иной кинетической модели, является возможность при помощи выбранной модели рассчитать выход на равновесный состав при заданной динамике перехода к равновесному состоянию. Выбор кинетической схемы и соответствующего набора констант скоростей реакций, позволяющих с приемлемой точностью описать неравновесный процесс в заданном диапазоне изменения давлений и температур, должны определяться из сопоставления расчетных данных с результатами эксперимента.

Таблица 1

| № | Уравнение реакции | $k'$ | $k''$ |
|---|---|---|---|
| Модель 1 – [7] | | | |
| 1 | $OH+H_2 \leftrightarrow H_2O+H$ | $2{,}0\cdot10^7\cdot\exp(-2{,}6/T^*)$ | $8{,}4\cdot10^7\cdot\exp(-10{,}116/T^*)$ |
| 2 | $H+O_2\leftrightarrow OH+O$ | $2{,}2\cdot10^8\cdot\exp(-8{,}455/T^*)$ | $1{,}5\cdot10^7$ |
| 3 | $O+H_2\leftrightarrow OH+H$ | $7{,}5\cdot10^7\cdot\exp(-5{,}586/T^*)$ | $3{,}0\cdot10^7\cdot\exp(-4{,}429/T^*)$ |
| 4 | $O+H_2O \leftrightarrow 2OH$ | $5{,}8\cdot10^6\cdot\exp(-9{,}059/T^*)$ | $5{,}3\cdot10^6\cdot\exp(-0{,}503/T^*)$ |
| 5 | $H_2+M\leftrightarrow 2H+M$ | $5{,}5\cdot10^{12}\cdot T^{-1}\exp(-51{,}987/T^*)$ | $1{,}8\cdot10^6\cdot T^{-1}$ |
| 6 | $O_2+M\leftrightarrow 2O+M$ | $7{,}2\cdot10^{12}\cdot T^{-1}\exp(-59{,}34/T^*)$ | $4{,}0\cdot10^5\ T^{-1}$ |
| 7 | $H_2O+M\leftrightarrow OH+H+M$ | $5{,}2\cdot10^{15}\cdot T^{-1{,}5}\exp(-59{,}386/T^*)$ | $4{,}4\cdot10^8\cdot T^{-1{,}5}$ |
| 8 | $OH+M\leftrightarrow O+H+M$ | $8{,}5\cdot10^{12}\cdot T^{-1}\exp(-50{,}83/T^*)$ | $7{,}1\cdot10^6\cdot T^{-1}$ |
| Модель 2 – набор 2 [8] | | | |
| 1 | $OH+H_2 \leftrightarrow H_2O+H$ | $2{,}19\cdot10^7\cdot\exp(-2{,}59/T^*)$ | $8{,}41\cdot10^7\cdot\exp(-10{,}57/T^*)$ |
| 2 | $H+O_2\leftrightarrow OH+O$ | $2{,}24\cdot10^8\cdot\exp(-8{,}844/T^*)$ | $1{,}3\cdot10^7$ |
| 3 | $O+H_2\leftrightarrow OH+H$ | $1{,}74\cdot10^7\cdot\exp(-4{,}76/T^*)$ | $7{,}33\cdot10^7\cdot\exp(-3{,}67/T^*)$ |
| 4 | $O+H_2O \leftrightarrow 2OH$ | $5{,}75\cdot10^7\cdot\exp(-9{,}47/T^*)$ | $5{,}75\cdot10^6\cdot\exp(-0{,}39/T^*)$ |
| 5 | $H_2+M\leftrightarrow 2H+M$ | $2{,}4\cdot10^{13}\cdot T^{-2}\exp(-61{,}518/T^*)$ | $7{,}5\cdot10^3\ T^{-1}$ |
| 6 | $O_2+M\leftrightarrow 2O+M$ | $5{,}8\cdot10^{10}\cdot T^{-1}\exp(-60{,}6/T^*)$ | $6{,}0\cdot10^2$ |
| 7 | $H_2O+M\leftrightarrow OH+H+M$ | $3{,}40\cdot10^{-1}$ | $9{,}26\cdot10^4\ T^{-1}$ |
| 8 | $OH+M\leftrightarrow O+H+M$ | $2{,}02\cdot10^{12}\cdot T^{-2}\exp(-52{,}0/T^*)$ | $2{,}0\cdot10^3\ T^{-1}$ |
| 9 | $H_2+O_2\leftrightarrow 2OH$ | $1{,}0\cdot10^{10}\cdot\exp(-35{,}2/T^*)$ | $3{,}42\cdot10^8\cdot\exp(-26{,}61/T^*)$ |
| Модель 3 – [9] | | | |
| 1 | $OH+H_2 \leftrightarrow H_2O+H$ | $2{,}0\cdot10^7\cdot\exp(-2{,}6/T^*)$ | $8{,}4\cdot10^7\cdot\exp(-10{,}116/T^*)$ |
| 2 | $H+O_2\leftrightarrow OH+O$ | $2{,}2\cdot10^8\cdot\exp(-8{,}8455/T^*)$ | $1{,}3\cdot10^7\ \exp(-0{,}35/T^*)$ |
| 3 | $O+H_2\leftrightarrow OH+H$ | $1{,}8\cdot10^4\cdot\exp(-4{,}48/T^*)$ | $8{,}3\cdot10^3\cdot T\cdot\exp(-5{,}5/T^*)$ |
| 4 | $O+H_2O \leftrightarrow 2OH$ | $5{,}8\cdot10^7\cdot\exp(-9{,}059/T^*)$ | $5{,}3\cdot10^6\cdot\exp(-0{,}503/T^*)$ |
| 5 | $H_2+M\leftrightarrow 2H+M$ | $2{,}2\cdot10^8\cdot\exp(-48{,}3/T^*)$ | $9{,}0\cdot10^5\ T^{-1}$ |
| 6 | $O_2+M\leftrightarrow 2O+M$ | $2{,}6\cdot10^{12}\cdot\exp(-59{,}8/T^*)$ | $1{,}1\cdot10^2\cdot T^{-1}\exp(0{,}9/T^*)$ |
| 7 | $H_2O+M\leftrightarrow OH+H+M$ | $10^{18}\cdot T^{-2{,}2}\exp(59{,}0/T^*)$ | $2{,}2\cdot10^{10}\ T^{-2}$ |
| 8 | $OH+M\leftrightarrow O+H+M$ | $8{,}5\cdot10^{12}\cdot T^{-1}\exp(-50{,}83/T^*)$ | $7{,}1\cdot10^6\ T^{-1}$ |
| 9 | $H_2+O_2\leftrightarrow 2OH$ | $1{,}7\cdot10^9\cdot\exp(-24{,}2/T^*)$ | $1{,}7\cdot10^7\cdot\exp(-14{,}81/T^*)$ |
| Модель 4 – набор 1 [8] | | | |
| 1 | $OH+H_2 \leftrightarrow H_2O+H$ | $3{,}0\cdot10^8\cdot\exp(-3{,}02/T^*)$ | $1{,}33\cdot10^9\cdot\exp(-10{,}95/T^*)$ |
| 2 | $H+O_2\leftrightarrow OH+O$ | $3{,}0\cdot10^8\cdot\exp(-8{,}81/T^*)$ | $2{,}48\cdot10^7\cdot\exp(-0{,}66/T^*)$ |
| 3 | $O+H_2\leftrightarrow OH+H$ | $3{,}0\cdot10^8\cdot\exp(-4{,}03/T^*)$ | $1{,}3\cdot10^8\cdot\exp(-2{,}49/T^*)$ |
| 4 | $O+H_2O \leftrightarrow 2OH$ | $3{,}12\cdot10^9\cdot\exp(-12{,}51/T^*)$ | $3{,}0\cdot10^8\cdot\exp(-3{,}02/T^*)$ |
| 5 | $H_2+M\leftrightarrow 2H+M$ | $1{,}35\cdot10^{11}\cdot T^{-1}\exp(-54/T^*)$ | $1{,}0\cdot10^{4}\cdot$ |
| 6 | $O_2+M\leftrightarrow 2O+M$ | $5{,}8\cdot10^{10}\cdot T^{-1}\exp(-60{,}6/T^*)$ | $6{,}0\cdot10^2$ |
| 7 | $H_2O+M\leftrightarrow OH+H+M$ | $9{,}66\cdot10^{12}\cdot T^{-1}\exp(-62{,}2/T^*)$ | $1{,}0\cdot10^5$ |
| 8 | $OH+M\leftrightarrow O+H+M$ | $8{,}0\cdot10^{10}\cdot T^{-1}\exp(-52{,}2/T^*)$ | $1{,}0\cdot10^4$ |
| 9 | $H_2+O_2\leftrightarrow 2OH$ | $2{,}72\cdot10^7\cdot\exp(-29{,}2/T^*)$ | $8{,}34\cdot10^4\cdot\exp(-10{,}32/T^*)$ |

**Моделирование неравновесного течения**. С целью верификации выполнено сравнение результатов численного моделирования неравновесного течения в осесимметричном канале переменного поперечного сечения с экспериментальными данными, моделирующими процесс горения топлива в камере сгорания ПВРД [13]. Схема канала представлена на рис. 2.

Расчеты выполнены при следующих значениях определяющих геометрических и газодинамических параметров, соответствующих условиям проведения эксперимента. Цилиндрическая часть канала имеет длину 0,64 м и диаметр 0,07 м, коническая часть длиной 0,22 м с внутренними диаметрами входа и выхода 0,07 м и 0,078 м соответственно.

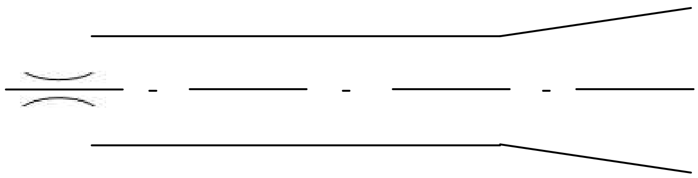

Рис. 2

Топливо подается через центральное сопло цилиндрического канала радиусом $r$ =0,01 м. Истечение воздушно-водородной смеси происходит со следующими значениями газодинамических параметров на срезе сопла: статическая температура $T_{jet}$ =130 К; статическое давление $P_{jet}$ =0,616 бар; число Маха на срезе сопла $M_{jet}$ =2,4; массовые концентрации компонентов: водорода $C_{H_2}^{jet}$ =0,03; кислорода $C_{O_2}^{jet}$ =0,22; азота $C_{N_2}^{jet}$ =0,75. Компонентный состав воздуха задается в рамках простейшей модели (77 % $N_2$ и 23 % $O_2$ по массе). В спутном потоке: статическая температура $T_{air}$ =919 К; статическое давление $P_{air}$ =0,603 бар; число Маха $M_{air}$ =2,75; массовые концентрации компонентов: кислорода $C_{O_2}$ =0,23; азота $C_{N_2} = 0{,}57 \div 0{,}77$; паров воды $C_{H_2O} = 0 \div 0{,}2$. Такой состав спутного потока обусловлен условиями проведения эксперимента. В эксперименте подогрев воздуха в спутном потоке осуществлялся путем сжигания керосина (продукты сгорания которого содержат пары воды) с полнотой сгорания $\eta \approx 1$. Для компенсации использованного окислителя подавался дополнительный кислород для обеспечения массового содержания в спутном потоке 23 % кислорода.

При проведении расчетов принято: характерное число Рейнольдса, определенное по параметрам спутного потока и радиусу канала $\mathrm{Re} = 4 \cdot 10^5$; значение безразмерного коэффициента турбулентной кинематической вязкости в начальном сечении $\overline{\nu_{t0}} = \nu_{t0} / \nu_{lam\,0}$ = 0,1, где $\nu_{t0}$ – турбулентная кинематическая вязкость, $\nu_{lam\,0}$ – ламинарная кинематическая вязкость; количество узлов расчетной сетки в поперечном направлении $NJ$ $=101 \div 401$, шаг по продольной координате $\Delta\overline{x} = 0{,}05 \div 0{,}001$.

На рис. 3 представлены графики распределения безразмерного статического давления на стенке канала, отнесенного к давлению торможения в спутном потоке $P / P_{0air}$ , полученные при численном моделировании неравновесного течения с использованием кинетических моделей 1 – 4 и экспериментальные точки (●) [13]. Номера линий соответствуют номерам кинетических моделей таблицы 1. Концентрация паров воды в спутном потоке полагалась $C_{H_2O} = 0$.

Полученные результаты демонстрируют, что используемая в расчете кинетическая модель окисления водорода в кислороде воздуха оказывает значительное влияние на распределение всех газодинамических параметров неравновесного течения, в частности давления на стенке канала. Использование моделей 1 и 4 приводит к сильно заниженному значению задержки воспламенения, применение модели 3, наоборот, значительно увеличивает задержку воспламенения. Использование модели 2 при численном моделировании сверхзвукового истечения воздушно-водородной смеси в спутный сверхзвуковой поток воздуха в канале переменного сечения демонстрирует удовлетворительное согласование расчетных и экспериментальных данных как по задержке воспламенения, так и уровню тепловыделения.

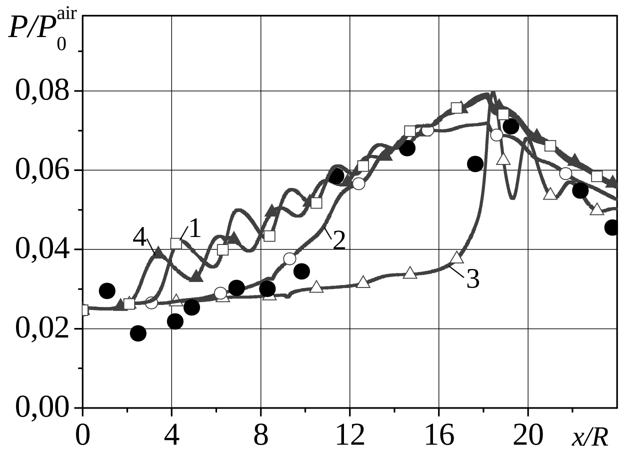


Рис. 3

**Исследование влияния содержания паров воды в спутном потоке на величину задержки воспламенения.** При расчете неравновесных течений газовых смесей необходимо с особой тщательностью подходить к заданию начального компонентного массового состава реагирующей газовой смеси. Различия в начальном составе являются причиной, оказывающей существенное влияние на время задержки воспламенения. Введение добавок, изменение начального уровня концентрации активных центров, добавление паров воды оказывает значительное влияние на сокращение периода индукции кинетического механизма окисления водорода [11].

С целью выяснения чувствительности кинетической модели к изменению начального компонентного состава и влияния его на величину задержки воспламенения, проведены параметрические расчеты с добавлением паров воды в спутный поток воздуха. Для моделирования химической кинетики используется кинетическая модель 3 [10]. Выбор именно этой схемы обусловлен тем, что при ее использовании получается наибольший период индукции при воспламенении водорода в воздухе. Поскольку добавление паров воды приводит к уменьшению задержки воспламенения, то использование выбранной схемы приводит к лучшему согласованию с экспериментальными данными.

В таблице 2 представлен массовый компонентный состав спутного потока в начальном сечении при различных значениях массового содержания паров воды. Во всех рассмотренных вариантах в соответствии с [13] концентрация кислорода в спутном потоке остается неизменной ( $C_{O_2}^{air}$ =0,23), а концентрация азота уменьшается при увеличении массового содержания паров воды.

Таблица 2

| № | $C_{H_2O}^{air}$ | $C_{O_2}^{air}$ | $C_{N_2}^{air}$ |
|---|---|---|---|
| 1 | 0,01 | 0,23 | 0,76 |
| 2 | 0,02 | 0,23 | 0,75 |
| 3 | 0,03 | 0,23 | 0,74 |
| 4 | 0,1 | 0,23 | 0,67 |

На рис. 4 представлены графики, иллюстрирующие влияние содержания паров воды в спутном потоке на распределение безразмерного статического давления на стенке канала $P/P_{0air}$ . Номера кривых соответствуют номерам вариантов задания начального компонентного состава спутного потока таблицы 2, значками (●) обозначены экспериментальные данные [13].

Область резкого повышения давления на представленных кривых соответствует началу воспламенения. Поэтому область задержки воспламенения на представленных графиках определяется участком медленного повышения давления. Чем выше содержание паров воды в спутном потоке, тем раньше происходит воспламенение топлива.

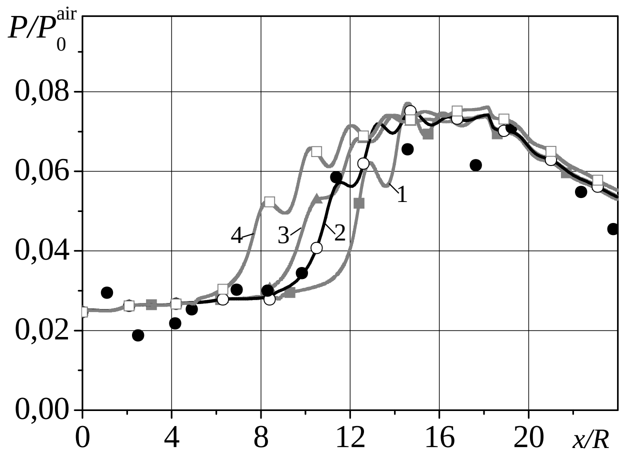


Рис. 4

Из полученных результатов можно сделать вывод, что добавление паров воды приводит к уменьшению задержки воспламенения топлива. Это объясняется тем, что добавляемая вода, вступая в реакцию диссоциации по стадии 7 таблицы 1, увеличивает концентрацию активных центров (свободных радикалов O и H), что и ведет к сокращению периода индукции. Поэтому при проведении расчетов следует обращать внимание на точность задания начального компонентного состава неравновесной газовой смеси. В условиях содержания паров воды в спутном потоке использование при численном моделировании сверхзвукового неравновесного течения в канале кинетической модели 3 [10] приводит к лучшему согласованию численных исследований с экспериментальными данными. Выбор кинетической схемы, используемой для численного моделирования неравновесного течения в заданном диапазоне термодинамических и газодинамических параметров, должен основываться на результатах сравнения с экспериментальными данными.

**Выводы.** С целью моделирования механизма химической кинетики рассмотрены 4 кинетические схемы, описывающие процесс окисления водорода в воздухе в рамках 8 – 9 химических реакций. Тестирование рассмотренных схем, выполненное в рамках модели идеального реактора, показало существенное влияние используемой кинетической модели горения на величину задержки воспламенения.

Выполнено численное моделирование сверхзвукового турбулентного неравновесного течения в осесимметричном канале переменного сечения в рамках модели вязкого слоя с использованием маршевого алгоритма. На основании сравнения с экспериментальными данными выбрана рациональная кинетическая модель горения водорода в кислороде воздуха, включающая 9 химических реакций и позволяющая адекватно определить период индукции и величину тепловыделения в процессе горения. В результате проведенных численных исследований показано, что добавление паров воды даже в незначительном количестве приводит к существенному уменьшению задержки воспламенения топлива.


1. *Тимошенко В. И.* Турбулентное смешение и горение сверхзвуковой воздушно-водородной струи в спутном ограниченном дозвуковом потоке / *В. И. Тимошенко, И. С. Белоцерковец* // Аэродинамика. Проблемы и перспективы : Сб. статей. – Харьков : Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т». – 2009. – С. 158 – 175.
2. *Лойцянский Л. Г.* Механика жидкости и газа / *Л. Г. Лойцянский*. – М. : Наука. Гл. ред. физ-мат. лит. – 1987. – 840 с.
3. *Гуляев А. Н.* К созданию универсальной однопараметрической модели турбулентной вязкости / *А. Н. Гуляев, В. Е. Козлов, А. Н. Секундов* // МЖГ. – 1993. – № 4. – С. 69 – 81.
4. *Ковеня В. М.* Метод расщепления в задачах газовой динамики / *В. М. Ковеня, Н. Н. Яненко*. – Новосибирск : Наука, 1981. – 304 с.
5. *Gear C. W. Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations / C. W. Gear. – New Jersey: Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, 1971.*
6. *Тимошенко В. И.* Маршевый расчет течения при взаимодействии сверхзвуковой турбулентной струи со спутным ограниченным дозвуковым потоком / *В. И. Тимошенко, И. С. Белоцерковец //* Вісник Дніпропетровського університету. – 2008. – Т. 1. Вып. 1. – С. 15 – 23.
7. *Родионов А. В.* Новый маршевый метод расчета струй продуктов сгорания / *А. В. Родионов* // Журн. выч. мат. и матем. физики.– 2002. – Т. 42, №9. – С. 1413 – 1424.
8. *Ивенс Дж. С.* Влияние химической кинетики и неполноты смешения на горение водорода в сверхзвуковом потоке */ Дж. С. Ивенс, Ч. Дж. мл. Шекснайдер //* Ракетная техника и космонавтика. – 1980. – Т. 18, № 4. – С. 77 – 84.
9. *Баев В. К.* Горение в сверхзвуковом потоке / *В. К. Баев, В. И. Головичев, П. К. Третьяков.* – Новосибирск : Наука, 1986. – 301 с.
10. *Даутов Н. Г.* К вопросу о выборе кинетической схемы при описании детонации в смеси $H_2$ + воздух за ударными волнами / *Н. Г. Даутов, А. М. Старик* // Теплофизика высоких температур. – 1993. – Т. 31, № 2. – С. 292 – 301.
11. *Головичев В. И.* Численный анализ кинетических моделей воспламенения водорода / *В. И. Головичев, В. И. Димитров, Р. И. Солоухин* // Физика горения и взрыва. – 1973. – № 1. – С. 95 – 101.
12. *Галицейский К. Б.* Моделирование догорания высокоскоростных турбулентных струй / *К. Б. Галицейский* // Физика горения и взрыва. – 2006. – Т. 42, № 2. – С. 3 – 9.
13. *Зимонт В. Л.* Горение водорода в сверхзвуковом потоке в канале при наличии псевдоскачка / *В. Л. Зимонт, В. М. Левин, Е. А. Мещеряков* // Физика горения и взрыва. – 1978. – Т. 14, № 4. – С. 23 – 36.



Институт технической механики
НАН Украины и ГКА Украины,
Днепропетровск



Получено 07.02.14,
в окончательном варианте 13.03.14