DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ ПОЛИДИСПЕРСНЫХ ГАЗОКАПЕЛЬНЫХ СМЕСЕЙ С ХИМИЧЕСКИМ ПРЕВРАЩЕНИЯМИ

Н. Н. Смирнов^{1,2,a}, В. В. Тюренкова^{2,1,6}, Л. И. Стамов^{2,1,6}, Дж. Хадем³

¹ Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация

² Федеральное государственное учреждение «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук», г. Москва, Российская Федерация

^a ORCID: http://orcid.org/0000-0001-6280-1522, ebifsun1@mech.math.msu.su; ⁶ tyurenkova.v.v@yandex.ru; ⁶ ORCID: http://orcid.org/0000-0001-8350-3137, lyubens@mail.ru ³ Университет Бирджанда, Бирджанд, Южный Хорасан, Иран, jkhadem@birjand.ac.ir

Аннотация: в статье представлен обзор результатов теоретических, численных и экспериментальных исследований процессов горения и инициирования детонации в гетерогенных полидисперсных смесях. Обсуждаются проблемы распыления, испарения и горения капель топлива, а также неравновесные эффекты при распылении капель и фазовых переходах. Влияние неоднородности размеров капель и неоднородности пространственного распределения на воспламенение смеси и ускорение пламени было исследовано для сильного и мягкого инициирования детонации: ударной волной и искровым зажиганием с последующим переходом от дефлаграции к детонации (ДДТ). Изучены особенности впрыска и зажигания струи в реакционной камере.

Ключевые слова: горение, аэрозоль, полидисперсная смесь, неравновесные эффекты, неоднородность.

Благодарности: авторы выражают благодарность за финансовую поддержку Российскому фонду фундаментальных исследований (грант № 20-03-00297).

Для цитирования: Смирнов Н. Н., Тюренкова В. В., Стамов Л. И., Хадем Дж. Вычислительное моделирование течений полидисперсных газокапельных смесей с химическим превращениями. *Успехи кибернетики*. 2021;2(2):29–41. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-3.

SIMULATION OF POLYDISPERSE GAS-DROPLET MIXTURE FLOWS WITH CHEMICAL TRANSFORMATIONS

Nikolay N. Smirnov^{1,2,a}, Veronika V. Tyurenkova^{2,1,b}, Lyuben I. Stamov^{2,1,c}, Javad Khadem³

¹ Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation

² Federal State Institution "Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences", Moscow, Russian Federation

^a ORCID: http://orcid.org/0000-0001-6280-1522, ebifsun1@mech.math.msu.su, mech.math.msu@inbox.ru;
 ^b tyurenkova.v.v@yandex.ru; ^c ORCID: http://orcid.org/0000-0001-8350-3137, lyubens@mail.ru
 ³ University of Birjand, Birjand, South Khorasan, Iran, jkhadem@birjand.ac.ir

Abstract: the paper presents the results of theoretical, numerical and experimental investigations of combustion and detonation initiation in heterogeneous polydispersed mixtures. The problems of fuel droplets atomization, evaporation and combustion, and the non-equilibrium effects in droplets atomization and phase transitions are discussed. The effects of droplets size non-uniformity and spatial distribution non-uniformity on mixture ignition and flame acceleration were investigated for strong and mild initiation of detonation: by a shock wave and spark ignition followed by deflagration to detonation transition (DDT). The features of jet injection and ignition in a reaction chamber are studied.

Keywords: combustion, aerosol, polydisperse mixture, non-equilibrium effects, non-uniformity.

Acknowledgements: the reported study was funded by RFBR, project No. 20-03-00297.

Cite this article: Smirnov N. N., Tyurenkova V. V., Stamov L. I., Khadem J. Simulation of Polydisperse Gas-Droplet Mixture Flows with Chemical Transformations. *Russian Journal of Cybernetics*. 2021;2(2):29–41. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-3.

Введение

Цель настоящего исследования — разработка, тестирование и верификация суперкомпьютерной модели для описания неравновесных волновых процессов в химически реагирующих многофазных средах и на ее основе исследования особенностей переходных процессов, а именно: установления детонационного режима, а также его расщепления на ударную волну и следующую за ней волну дефлаграции. Актуальность фундаментального исследования определяется необходимостью решения двух проблем противоположной направленности:

1. Проблема взрывобезопасности, которая заключается в организации эффективных превентивных мер, направленных на достижение двух целей: предотвращения перехода горения в детонацию в случае воспламенения горючей смеси, а также подавления детонационной волны в случае ее возникновения.

Знание методов управления этими переходными процессами необходимо при оценке воздействия на окружающую среду разрушения резервуаров с горючими компонентами и последующим воспламенением топливо-воздушной смеси и развитием взрыва.

2. Применение детонационного режима сжигания топливо-воздушных смесей может быть более эффективным для разработки двигателей нового поколения. Возможности по совершенствованию химических ракетных двигателей традиционных типов или турбореактивных двигателей практически полностью исчерпаны и ограничены незначительным улучшением энергомассовых характеристик.

Качественный скачок в развитии двигателестроения может быть достигнут путем разработки и внедрения принципиально новых типов двигателей. Перспективные направления исследований для создания новых типов двигателей — это использование быстрых режимов горения, а именно детонации. Преимущество данного режима заключается в значительной экономии горючего вследствие более высокой термодинамической эффективности детонационного горения и низкого выхода вредных веществ. Поскольку большинство горючих смесей являются многофазными, в которых горючее и окислитель находятся в разных фазах и предварительно не перемешаны, возрастает роль предсказательного вычислительного моделирования и управления процессами установления детонации в неоднородных многофазных химически реагирующих средах с учетом процессов турбулентного перемешивания.

В рамках проведенного исследования разработана суперкомпьютерная модель неравновесных волновых процессов в химически реагирующих многофазных смесях горючего и окислителя. Модель включает блок-модели неравновесных фазовых переходов конденсированных частиц в газовую фазу, турбулентного перемешивания и химических реакций, дробления капель жидкой конденсированной фазы при взаимодействии с потоком несущей газообразной фазы, модели межфазного обмена энергией и импульсом. Проведено тестирование вычислительного кода на различных режимах работы в заданном диапазоне изменения определяющих параметров задачи. Выделены области изменения определяющих параметров, в которых код работает устойчиво и без сбоев. Верификация созданной вычислительной модели проведена на предмет адекватности нахождения решений определяющей системы дифференциальных уравнений. Валидация разработанной физической и математической моделей на предмет адекватности описания ими исследуемых физико-химических процессов проведена путем сравнения результатов модельных расчетов с экспериментальными данными. Произведена настройка параметров модели для получения удовлетворительного согласия расчетных и экспериментальных данных.

Математическая модель

Математические модели для моделирования турбулентных химически реагирующих течений в гетерогенных смесях подробно описаны в [1, 2]. Процессы горения в гетерогенных смесях сильно отличаются от процессов горения в гомогенных смесях, поскольку они регулируются не только химией, но и физическими процессами, такими как распыление капель [3, 4], испарение и диффузионное перемешивание паров горючего с окислителем.

В данных моделях используются как детерминированные методы механики многофазных течений для определения средних значений параметров газовой фазы, так и стохастические методы для описания эволюции полидисперсных частиц и флуктуаций параметров. Таким образом, можно оценить влияние хаотических пульсаций на скорость выделения энергии и средние значения параметров потока. Перенос кинетической энергии турбулентных пульсаций в то же время подчиняется детерминированным законам, являющимся макроскопической характеристикой. Усредняя по Фавру с массой $\alpha \rho$ (α — объемная доля газовой фазы, ρ — плотность газа), мы получаем следующую систему для газовой фазы в многофазном потоке [5] (символы усреднения удалены для простоты):

$$\partial_t(\alpha\rho) + \nabla \cdot (\alpha\rho\vec{u}) = \dot{M},\tag{1}$$

$$\partial_t (\alpha \rho Y_k) + \nabla \cdot (\alpha \rho Y_k \vec{u}) = -\nabla \cdot \vec{I}_k + \dot{M}_k + \dot{\omega}_k, \tag{2}$$

$$\partial_t (\alpha \rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\alpha \rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = \alpha \rho \vec{g} - \alpha \nabla p + \nabla \cdot \tau + \vec{K}, \tag{3}$$

$$\partial_t(\alpha\rho E) + \nabla \cdot (\alpha\rho E\vec{u}) = \alpha\rho\vec{u}\cdot\vec{g} - \nabla \cdot p\vec{u} - \nabla \cdot \vec{I}_q + \nabla \cdot (\tau \cdot \vec{u}) + \dot{E}.$$
(4)

Уравнения (1–4) включают баланс массы в газовой фазе, баланс массы k-го компонента, баланс количества движения и баланс энергии соответственно. Здесь p — давление, \vec{u} — вектор скорости жидкости, \vec{g} — вектор ускорения свободного падения, E — удельная энергия, \vec{K} — удельный поток импульса в газовую фазу, \dot{M} — удельный поток массы, \dot{E} — удельный поток энергии, τ — тензор турбулентных напряжений, \vec{l}_k — турбулентный диффузионный поток k-й компоненты. Также члены в уравнениях (1–2) связаны следующими соотношениями:

$$\sum_{k} Y_{k} = 1, \qquad \sum_{k} \dot{M}_{k} = \dot{M}, \qquad \sum_{k} \vec{I}_{k} = 0, \qquad \sum_{k} \dot{\omega}_{k} = 0$$

Используются следующие уравнения состояния газовой смеси:

$$p = R_g \rho T \sum_{k} Y_k / W_k,$$

$$E = \sum_{k} Y_k (c_{vk} T + h_{0k}) + \frac{\vec{u}^2}{2} + k,$$
(5)

где E — энергия газа, k — турбулентная кинетическая энергия, W_k — молярная масса k-го компонента газа, h_{0k} – удельная химическая энергия, c_{vk} — удельная теплоемкость, Y_k — массовая концентрация kго компонента газа, T — температура газа, R_g — универсальная газовая постоянная. Член, отвечающий за химические превращения, $\dot{\omega}_k$ очень чувствителен к изменениям температуры, поскольку обычно выражается функцией типа закона Аррениуса для скоростей реакций. Чтобы учесть изменения температуры, исходный член $\dot{\omega}_k$ в уравнениях (2) был смоделирован с использованием квадратурной формулы Гаусса.

Рассмотрим температуру как стохастическую функцию T со средним \overline{T} и среднеквадратичными отклонениями $\theta = \overline{T'T'}$. Тогда среднее значение функции, имеющей T в качестве независимой переменной, может быть определено следующим образом:

$$\overline{f(T)} = \int f(\overline{T} + \zeta \sqrt{\theta}) P_d(\zeta) d\zeta,$$

где ζ — случайное значение с нулевым математическим ожиданием и единичным отклонением, а его плотность вероятности равна $P_d(\zeta)$. Для оценки интеграла используется минимальное количество слагаемых (а именно три), и $P_d(\zeta)$ предполагается четным. В этом случае формула для усреднения f(T) имеет следующий вид:

$$\overline{f(T)} = \frac{1}{2\chi^2} f(\overline{T} - \chi\sqrt{\theta}) + \left(1 - \frac{1}{\chi^2}\right) f(\overline{T}) + \frac{1}{2\chi^2} f(\overline{T} + \chi\sqrt{\theta}).$$

В случае нормального (гауссовского) отклонения значение χ равно $\sqrt{3}$ (случай Гаусса–Эрмита). Следовательно, приведенная выше формула может быть преобразована следующим образом:

$$\overline{f(T)} = \frac{1}{6}f(\overline{T} - \sqrt{3\theta}) + \frac{2}{3}f(\overline{T}) + \frac{1}{6}f(\overline{T} + \sqrt{3\theta})$$

В нашем случае функция f(T) зависит от температуры по закону Аррениуса, а все средние значения для $\dot{\omega}_k$ являются комбинацией этих зависимостей. В законе Аррениуса для $\dot{\omega}_k$ использовались

усредненные величины массовых долей и плотности, поскольку зависимость от этих функций не такая сильная, как зависимость от температуры.

Турбулентный тепловой поток \vec{l}_q в уравнении (4) складывается из двух слагаемых:

$$\vec{I}_q = \vec{J}_q + \sum_k (c_{pk}T + h_{0k})\vec{I}_k, \tag{6}$$

где \vec{J}_q можно интерпретировать как турбулентный теплопроводный поток тепла. Вихревая кинематическая вязкость ν^t выражается в соответствии с моделью к-эпсилон как $\nu^t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$. Турбулентные потоки имеют следующий вид:

$$\tau = \alpha(\mu + \rho\nu^t)(\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T - (2/3)(\nabla \cdot \vec{u})U) - (2/3)\alpha\rho kU,$$
(7)

$$\vec{I}_k = -\alpha \rho (D + (\nu^t / \sigma_d)) \nabla Y_k, \tag{8}$$

$$\vec{J}_q = -\alpha(\lambda + \sum_k c_{pk}\rho(\nu^t/\sigma_t))\nabla T.$$
(9)

Модель замыкается уравнениями для k, θ и ϵ :

$$\partial_t(\alpha\rho k) + \nabla \cdot (\alpha\rho\vec{u}k) = \nabla \cdot (\alpha(\mu + \rho(\nu^t/\sigma_k))\nabla k) + \tau^t : \nabla\vec{u} - \alpha\rho\varepsilon,$$
(10)

$$\partial_t(\alpha\rho\varepsilon) + \nabla \cdot (\alpha\rho\vec{u}\varepsilon) = \nabla \cdot (\alpha(\mu + \rho(\nu^t/\sigma_\varepsilon))\nabla\varepsilon) + (\varepsilon/k)(C_{1\varepsilon}\tau^t : \nabla\vec{u} - C_{2\varepsilon}\alpha\rho\varepsilon), \tag{11}$$

$$\partial_{t}(\alpha\rho\theta) + \nabla \cdot (\alpha\rho\vec{u}\theta) = \nabla \cdot (\alpha(\mu + \sum_{k} c_{pk}\rho(\nu^{t}/\sigma_{k}))\nabla\theta) + P_{\theta} + W_{\theta} - D_{\theta},$$
(12)

где производство P_θ, W_θ и диссипация D_θ определяются следующими соотношениями:

$$P_{\theta} = 2\alpha\rho\tilde{c}_{p}\frac{\nu_{t}}{\sigma_{k}}|\nabla T|^{2}, \qquad \qquad W_{\theta} = -\sum_{k}\overline{\omega_{k}T'}h_{0k}, \qquad \qquad D_{\theta} = C_{g}\alpha\rho\sum_{k}c_{pk}\frac{\varepsilon}{k}\frac{\theta}{\theta_{m}-\theta}.$$
(13)

Константы принимают следующие значения [5]:

$$C_{\mu} = 0.09,$$
 $C_{1\varepsilon} = 1.45,$ $C_{2\varepsilon} = 1.92,$ $\sigma_{d} = 1,$ $\sigma_{t} = 0.9,$
 $\sigma_{k} = 1,$ $\sigma_{\varepsilon} = 1.13,$ $\theta_{m} = \overline{T}^{2}/4,$ $C_{g} = 2.8.$

Видно, что уравнения (10–12) не содержат членов, ответственных за вклад той или иной фазы в рост энергии турбулентности. Это связано с прямым стохастическим моделированием дисперсной фазы: влияние последней на газовую фазу приводит к стохастическому поведению членов источника импульса \vec{K} . Эти члены влияют на усредненную скорость газовой фазы стохастическим образом и, следовательно, также влияют на исходный член $\tau^t : \nabla \vec{u}$. Движение полидисперсных капель (частиц) моделируется с использованием стохастического подхода. Выделяется группа типичных модельных частиц. Движение этих частиц моделируется непосредственно с учетом влияния среднего потока газа и пульсаций параметров в газовой фазе. Подробно процедура описана в работах [1, 2, 5].

Неравновесные эффекты газокапельного взаимодействия для испаряющихся капель и для горящих капель учитывались на основе взаимодействия одиночной капли топлива с нагретым потоком окислителя [6–8]. Эффективность численной схемы представляла собой линейную функцию: время расчета прямо пропорционально увеличению ячеек в газовой фазе и количеству капель модели.

Движение полидисперсных капель моделируется с использованием стохастического подхода. Выделяется группа типичных модельных капель, каждая из которых представляет собой ряд реальных капель. Движение этих капель моделируется непосредственно с учетом влияния среднего потока газа и пульсаций параметров в газовой фазе [1, 2], а также испарения и распыления. Таким образом, большое количество реальных капель (капель жидкости) моделировалось ансамблем модельных капель. Каждая модельная частица характеризовалась вектором значений, представляющим ее местоположение, скорость, массу, количество реальных капель, представленных данной моделью, и другие свойства. Приведено минимальное среднее количество капель модели на узел сетки, что гарантирует достаточную точность оценки потоков между фазами.

$$m\frac{d\vec{u}}{dt} = m\vec{g} - \phi \cdot \nabla p + \vec{f}_d, \qquad \qquad \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{u}, \qquad \qquad \vec{f}_d = \frac{C_d}{2}\rho_g \frac{\pi d^2}{4}(\vec{v} - \vec{u})|\vec{v} - \vec{u}|, \qquad (14)$$

Коэффициент лобового сопротивления является функцией числа Рейнольдса:

$$C_{d} = \left(\frac{24}{Re} + \frac{4,4}{\sqrt{Re}} + 0,42\right)\beta \cdot K, \quad Re = \frac{\rho|\vec{v} - \vec{u}|d}{\mu}, \quad \beta = \sqrt{\frac{\rho}{\rho_{s}}\left(2 - \frac{\rho}{\rho_{s}}\right)}, \quad K = \left(\frac{T}{T_{s}}\right)^{4/5},$$

$$\frac{\rho_{s}}{\rho} = \begin{cases} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2}M^{2}\right)^{1/(\gamma - 1)}, & M < 1, \\ \frac{(\gamma + 1)M^{2}}{(\gamma - 1)M^{2} + 2}\left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \cdot \frac{(\gamma - 1)M^{2} + 2}{2\gamma M^{2} - (\gamma - 1)}\right)^{1/(\gamma - 1)}, & M \ge 1. \end{cases}$$
(15)

Уравнение энергии капли имеет следующий вид [2, 5]:

$$m\frac{de}{dt} = q + Q_s,$$
 где $e = c_{vs}T_s + h_f^0,$ $Q_s = \frac{dm}{dt}h_L;$ (16)

где h_L — скрытая теплота испарения, Q_s — энергия фазовых переходов. Тепловой поток к одиночной капле от окружающего газового потока определяется следующим образом [6]:

$$q = \begin{cases} \pi d\lambda \cdot \text{Nu} \cdot (T - T_s), & Re < 1000, \\ \pi d^2 \rho |\vec{v} - \vec{u}| \cdot \text{St} \cdot (H_r - H_w), & Re \ge 1000, \end{cases} \quad \text{Nu} = 2 + 0.16 \cdot Re^{2/3} \cdot \Pr^{1/3}, \quad \text{St} = \frac{C_d}{2} \Pr^{-2/3}.$$
(17)

Модель неравновесного испарения используется для определения скорости испарения [2]:

$$\dot{m} = \pi d \cdot \rho D \cdot \operatorname{Nu} \cdot \log\left(\frac{1 - Y_e}{1 - Y_w}\right), \qquad Y_w = \frac{W_N P_0}{W p} \exp\left[\frac{H_b}{R}\left(\frac{1}{T_b \left(P_0\right)} - \frac{1}{T_s}\right)\right] - \dot{m} \frac{\sqrt{2\pi R T_s}}{\pi \delta_e p d^2}$$

Динамическое взаимодействие жидких капель с газовым потоком могло привести к неустойчивости границы раздела в сдвиговом потоке и распылению капель. Критерием неустойчивости жидких капель является критическое число Вебера [4, 7]: $We = \frac{\rho v_{rel}^2 d}{\sigma}$, где σ – поверхностное натяжение на границе раздела, v_{rel} – относительная скорость капли относительно газа.

При превышении критического значения числа Вебера происходит распад капель из-за колебательной неустойчивости. При значительном превышении критического числа Вебера другие механизмы начинают играть существенную роль в процессе разрушения, приводящего к образованию мелкодисперсного тумана [2, 4, 6]. Эти основные характеристики процесса распыления могут быть учтены следующей приближенной формулой [2], определяющей средние диаметры капель d_a , образующихся при распылении исходных капель (диаметр d):

$$d_{a} = \begin{cases} d = \left(\frac{6\alpha_{2}}{\pi n}\right)^{\frac{1}{3}}, & We < We_{*}, \\ \frac{dWe_{*}}{We}, & We_{*} \le We \le We_{**}, \\ d_{*}, & We > We_{**}, \end{cases} \quad We_{*} = 12(1 + Lp^{-0.8}), \quad We_{**} = 350, \end{cases}$$

где *n* — количество капель на единицу объема, *α*₂ — объемная доля фазы капли, *We*_{*} — критическое число Вебера, $Lp = \frac{d\rho_c \sigma}{\mu_c^2}$ — число Лапласа, *ρ*_c, *μ*_c — плотность и вязкость жидкости. Коалесценцией капель из-за столкновений пренебрегают. Это предположение справедливо для

Коалесценцией капель из-за столкновений пренебрегают. Это предположение справедливо для разреженных смесей. В настоящем моделировании мы будем изучать смеси, в которых объемная доля жидкости составляет 10^{-3} , что обеспечивает вероятность столкновения 10^{-6} .

Результаты численных исследований

Используя модель динамики одиночной капли, мы моделировали взаимодействие сильной ударной волны в воздухе с аэрозолем, состоящим из капель топлива. Капли аэрозоля имеют небольшой размер и сферическую форму. Исходное состояние аэрозоля полидисперсное, то есть можно рассматривать одновременное существование капель разного начального диаметра [4, 5].

При изучении взаимодействия ударной волны с аэрозолем последовательно рассматривается следующая иерархия моделей:

- 1) с учетом только силы сопротивления;
- 2) с учетом силы сопротивления и теплообмена;
- 3) с учетом сопротивления, теплопередачи и испарения;
- 4) с учетом силы сопротивления, теплопередачи, испарения и распыления капель;
- 5) с учетом сопротивления, теплопередачи, испарения, распыления капель и горения.

Проведено численное моделирование двумерного течения в цилиндрической трубе. Труба состоит из двух частей. Давление и температура на левой стороне $x \le b$ повышены ($P_1 = 10 \div 100$ бар, $T_1 = 1500$ K) по сравнению с условиями в правой части ($P_0 = 1$ бар, $T_0 = 300$ K). Левая часть заполнена воздухом, правая часть при $b < x < x_0$ также заполнена воздухом, а при $x \ge x_0$ добавлен аэрозоль (рис. 1). Длина трубки L = 2 м, диаметр D = 8 см. Плотность аэрозоля 0,8 кг/м³, что соответствует объемной концентрации 10^{-3} .



Рис. 1. Схематическое изображение постановки задачи

На рис. 2–6 представлены графики скорости ударной волны вдоль оси трубы для различных значений начальных отношений давлений P_1/P_0 . Разные кривые с номерами от 1 до 5 соответствуют разным моделям газокапельного взаимодействия, описанным выше.

На рис. 2 представлены результаты для начального перепада давлений $P_1/P_0=10$. Видно, что при попадании ударной волны в область, заполненную аэрозолем, скорость волны уменьшается. Наиболее интенсивное снижение скорости происходит при учете только сопротивления и теплопередачи (кривая 2), наименее интенсивное снижение скорости волны — при учете только сопротивления (кривая 1). Другие, более сложные модели соответствуют промежуточным результатам. Учет испарения приводит к меньшему снижению скорости ударной волны по сравнению с учетом только тепловых и механических потерь. Причина в следующем: испарение приводит к образованию за ударной волной дополнительного объема газа, который поддерживает ее распространение (кривая 3).

С увеличением начальной интенсивности ударной волны ($P_1/P_0=25$, рис. 3) наибольшее уменьшение ее интенсивности также происходит при учете сопротивления и теплообмена (кривая 2), а наименьшее — при учете сопротивления, теплообмена и испарения (кривая 3). Это связано с тем, что интенсивность испарения капель увеличивает объем газа. Учет распыления капель приводит к более быстрому уменьшению скорости ударной волны по сравнению с учетом термомеханического взаимодействия и испарения (кривая 4). Объяснение этого факта следующее: распыление капель приводит к образованию новой свободной поверхности, что увеличивает обмен импульсом и энергией между газом и конденсированной фазой; мелкие капельки замедляются и нагреваются намного быстрее, тем самым увеличивая потери импульса и энергии в потоке газа, что приводит к замедлению ударной волны. С учетом горения (кривая 5) около правого конца трубы скорость волны увеличивается до 1500-1700 м/с, что соответствует воспламенению газовой смеси и переходу горения в детонационный режим.

На рис. 4 результаты соответствуют интенсивности ударной волны $P_1/P_0=50$. Общий характер уменьшения интенсивности ударной волны в области, заполненной аэрозолем, остается аналогичным

предыдущим результатам, но с учетом горения (кривая 5) переход к детонации возникает на расстоянии 1,2–1,5 м от источника. Происходит очистка трубы; после этого интенсивность волны немного уменьшается. Такое поведение можно интерпретировать как переход от горения к детонации через перегруженный режим с последовательным замедлением до самоподдерживающейся стационарной скорости.

Рис. 5 соответствует начальному перепаду давлений $P_1/P_0=75$, а рис. 6 соответствует начальному перепаду давлений $P_1/P_0=100$. Из этих рисунков можно увидеть характер уменьшения интенсивности начальной ударной волны для моделей взаимодействия различной сложности. С учетом горения (кривая 5) ускорение горения и переход к детонации происходит на 1,2–1,3 м ($P_1/P_0=75$) — на 0,7-1,1 м ($P_1/P_0=100$). На рис. 6 показано, что детонация распространяется в перегруженном режиме (сильная детонация) на высоте 1,2–1,3 м, а затем замедляется до стационарного режима (детонация Чепмена–Жуге).



Рис. 2. Эволюция скорости ударной волны вдоль оси трубы при входе в дисперсную смесь для различных моделей газокапельного взаимодействия. *P*₁/*P*₀=10



Рис. 3. Эволюция скорости ударной волны вдоль оси трубы при входе в дисперсную смесь для различных моделей газокапельного взаимодействия. *P*₁/*P*₀=25

Рис. 8–12 показано распределение температуры и поля давления капли вдоль трубы для начального отношения давлений $P_1/P_0=75$ в последовательные моменты времени. Температура (а также распределение и размер) частиц изображены с помощью кружков в месте расположения каждой модельной частицы. Размер каждого кружка соответствует размеру капли, а цвет соответствует темпера-



Рис. 4. Эволюция скорости ударной волны вдоль оси трубы при входе в дисперсную смесь для различных моделей газокапельного взаимодействия. *P*₁/*P*₀=50



Рис. 5. Эволюция скорости ударной волны вдоль оси трубы при входе в дисперсную смесь для различных моделей газокапельного взаимодействия. *P*₁/*P*₀=75

туре. Размер модельных частиц пропорционально увеличен для лучшей видимости [4].

На рис. 8 показаны результаты, полученные при взаимодействии ударной волны с аэрозолем, с учетом только силы сопротивления (т. е. обмена импульсом). Видно, что со временем около оси трубы происходит разрежение аэрозоля, масса которого в целом остается неизменной. Это связано с тем, что вблизи оси трубы скорость газа за волной выше, чем у ее стенок, и частицы, уносимые волной, перемещаются на большее расстояние от своего первоначального местоположения. Некоторые частицы движутся влево против направления ударной волны. Это может быть связано с их взаимодействием со вторичными волнами, образованными в результате взаимодействия первичной волны с аэрозолем.

На рис. 9 показаны результаты, полученные при учете силы сопротивления и теплообмена (т. е. межфазного обмена импульсом и тепловой энергией). Из этого рисунка видно, что температура капель, взаимодействующих с ударной волной, увеличивается. Распределение частиц по трубе близко к изображенному на рис. 8.

На рис. 10 показаны результаты, полученные при учете испарения. Из этого рисунка видно, что капли практически по всему сечению трубы быстро испаряются после относительно короткой стадии



Рис. 6. Эволюция скорости ударной волны вдоль оси трубы при входе в дисперсную смесь для различных моделей газокапельного взаимодействия. *P*₁/*P*₀=100



Рис. 7. Пример взаимодействия ударной волны с каплей

повышения температуры. Этот этап удлиняется по мере того, как ударная волна проникает глубже от начала трубы из-за уменьшения интенсивности ударной волны и, соответственно, скорости газа за ней. Частицы у стенки испаряются намного медленнее из-за низкой относительной скорости газа (из-за условия прилипания скорости газа к стенкам трубы). В дальнейшем эти частицы удаляются от стенок и тем самым создают слабую концентрацию неиспарившейся дисперсной фазы далеко за начальной ударной волной.

На рис. 11 показаны результаты, полученные при учете распыления капель. Эти результаты аналогичны предыдущим (рис. 10, с учетом испарения, потоков тепла и импульса, без учета распыления капель), за исключением того факта, что испарение мелких капель после распыления становится намного более интенсивным. На последней стадии, когда ударная волна глубоко проникла в дисперсную смесь, шлейф взаимодействующих с ней частиц, но не испаряющихся, увеличивается за счет ослабления интенсивности ударной волны и, как следствие, уменьшения теплового потока к каплям от менее нагретого газа. Этот эффект аналогичен тому, который проявляется в случае испарения без учета распыления. Капли, примыкавшие к стенкам в момент взаимодействия с ударной волной, практически не распадаются и ведут себя так же, как и в случае без учета распыления (рис. 10).

При горении в газовой фазе учитывается (рис. 12), что фронт испарения частиц и фронт горения очень близки друг к другу; их форма практически совпадает с поперечным сечением трубки. Это связано со значительным увеличением относительной скорости газа за волной в режиме детонации.



Рис. 8. Учитывается только эволюция полей температуры (слева) и давления газа (справа) модельной капли при условии силы сопротивления. Начальная степень сжатия $P_1/P_0=75$

Выводы

Исследование различных моделей газокапельного взаимодействия позволило оценить роль различных эффектов в поведении ударной волны: механических потерь, тепловых потерь, испарения капель, распыления, воспламенения и горения паров топлива.

Показано, что при попадании ударной волны в область, заполненную аэрозолем, скорость волны уменьшается. Наиболее интенсивное снижение скорости происходит при учете только сопротивления и теплопередачи, наименее интенсивное снижение скорости волны – при учете только сопротивления.

Учет испарения приводит к меньшему снижению скорости ударной волны по сравнению с учетом только тепловых и механических потерь. Причина в следующем: испарение приводит к образованию за ударной волной дополнительного объема газа, который поддерживает ее распространение.

Учет распыления капель приводит к более быстрому уменьшению скорости ударной волны по сравнению с учетом термомеханического взаимодействия и испарения. Объяснение этого факта следующее: распыление капель приводит к образованию новой свободной поверхности, что увеличивает обмен импульсом и энергией между газом и конденсированной фазой; мелкие капельки замедляются и нагреваются намного быстрее, тем самым увеличивая потери импульса и энергии в потоке газа, что приводит к замедлению ударной волны.

С учетом горения после некоторого периода торможения в аэрозоле скорость ударной волны увеличивается до 1500-1700 м/с, что соответствует воспламенению газовой смеси и переходу горения в режим детонации.

Переход от горения к детонации происходит в режиме с перегрузкой (режим сильной детонации, характеризующийся повышенной скоростью и давлением) с последовательным замедлением до самоподдерживающейся стационарной скорости режима Чепмена–Жуге.



Рис. 9. Учитывается эволюция полей температуры модели капли (слева) и давления газа (справа) при условии силы сопротивления и теплообмена. Начальная степень сжатия $P_1/P_0=75$



Рис. 10. Эволюция полей температуры (слева) и давления газа (справа) модели при условии учета импульса, теплового и массообмена (испарения) между каплями и газовой фазой. Начальная степень сжатия $P_1/P_0=75$



Рис. 11. Эволюция полей температуры капли (слева) и давления газа (справа) при условии учета распыления капель, количества движения, теплового и массообмена (испарения) между каплями и газовой фазой. Начальная степень сжатия $P_1/P_0=75$



Рис. 12. Эволюция полей температуры капли (слева) и давления газа (справа) при условии учета распыления капель, импульса, теплового и массообмена (испарения) между каплями и газовой фазой, воспламенения и горения пара капли. Начальная степень сжатия $P_1/P_0=75$

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Smirnov N. N., Nikitin V. F., Legros J. C. Ignition and Combustion of Turbulized Dust Air Mixtures. *Combust. Flame.* 2000;123(1/2):46–67. DOI: 10.1016/S0010-2180(00)00147-4.
- Smirnov N. N., Nikitin V. F., Khadem J., Aliari Shourekhdeli Sh. Onset of Detonation in Polydispersed Fuel-Air Mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2007;31:832-841. DOI: 10.1016/j.proci.2006.07.018.
- Smirnov N. N. Combustion and Detonation in Multiphase Media. Initiation of Detonation in Dispersed-Film Systems behind a Shock Wave. *Int. J. Heat Mass Transfer*. 1988;31(4):779–793. DOI: 10.1016/0017-9310(88)90135-4.
- Khadem J. Ignition, Combustion and Detonation in Poly-Dispersed Fuel Air Mixtures. Dissertation. Moscow M. V. Lomonosov State University. 2005.
- Betelin V. B., Smirnov N. N., Dushin V. R., Nikitin V. F., Kushnirenko A. G., Nerchenko V. A. Evaporation and Ignition of Droplets in Combustion Chambers Modeling and Simulation. *Acta Astronautica*. 2012;70:23–35. DOI: 10.1016/j.actaastro.2011.06.021.
- Dushin V. R., Kulchitskiy A. V., Nerchenko V. A., Nikitin V. F., Osadchaya E. S., Phylippov Yu. G., Smirnov N. N. Mathematical Simulation for Non-Equilibrium Droplet Evaporation. *Acta Astronautica*. 2008;63:1360-1371. DOI: 10.1016/j.actaastro.2008.05.021.
- 7. Tyurenkova V. V. Non-Equilibrium Diffusion Combustion of a Fuel Droplet. *Acta Astronautica*. 2012;75:78-84. DOI: 10.1016/j.actaastro.2012.01.010.
- Tyurenkova V. V., Smirnova M. N., Nikitin V. F. Two-Phase Fuel Droplet Burning in Weightlessness. *Acta Astronautica*. 2020;176: 672-681. DOI: 10.1016/j.actaastro.2020.03.044.