

Вычисление внутренней структуры идеальной волны детонации

Введение

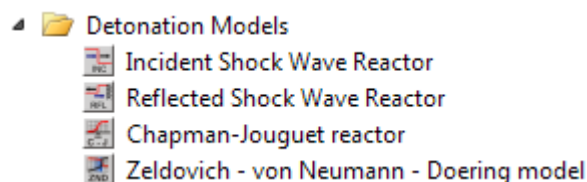
Распространяющаяся детонационная волна имеет характерную трехмерную структуру, которая отражается ячеистой структурой на закопченной стенке каналов. Эта структура характеризуется размером ячеек и часто используется для оценки критических условий инициирования, повторного инициирования и распространения детонации (прямое инициирование, распространение в каналах, выход из канала в открытое пространство). В ряде теоретических и экспериментальных исследований показано, что существует корреляция размеров детонационной ячейки и длины зоны индукции внутренней структуры идеальной 1D детонационной волны, предложенной Зельдовичем, Нейманом и Дерингом.

Постановка задачи

Требуется рассчитать длину зоны индукции идеальной волны детонации в водородно-воздушной смеси при окружающих условиях - $P = 1$ атм, $T = 300$ К (переменное стехиометрическое отношение $\varphi = 0,5 - 4$) и оценить ее корреляцию с размером детонационной ячейки той же топливно-воздушной смеси.

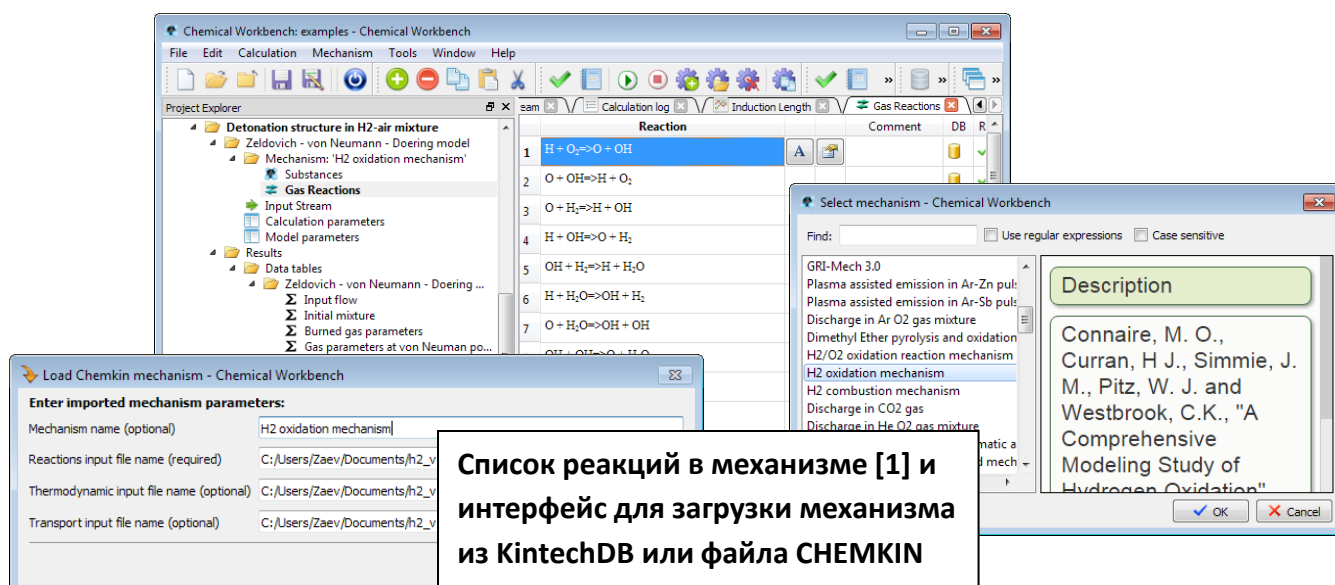
Решение задачи в Chemical Workbench

Чтобы рассчитать длину зоны индукции идеальной волны детонации, мы используем модель реактора детонации Зельдовича-Неймана-Деринга (ZND), доступную в Chemical Workbench. Эта модель требует информации об исходном составе смеси, химическом кинетическом механизме самовоспламенения и горения топлива и воздуха (список веществ и реакций, их термодинамические параметры и скорости) и начальные условия.



Список доступных детонационных моделей в Chemical Workbench

Химический кинетический механизм воспламенения водорода и горения в воздухе может быть загружен из базы данных KintechDB или импортирован из текстового файла в формате CHEMKIN. Загруженный механизм состоит из списка веществ с коэффициентами аппроксимации температурной зависимости термодинамических свойств и потенциалов взаимодействия и списка реакций с соответствующими коэффициентами для приближения температурной зависимости константы скорости реакции. Любые из этих свойств можно визуализировать.

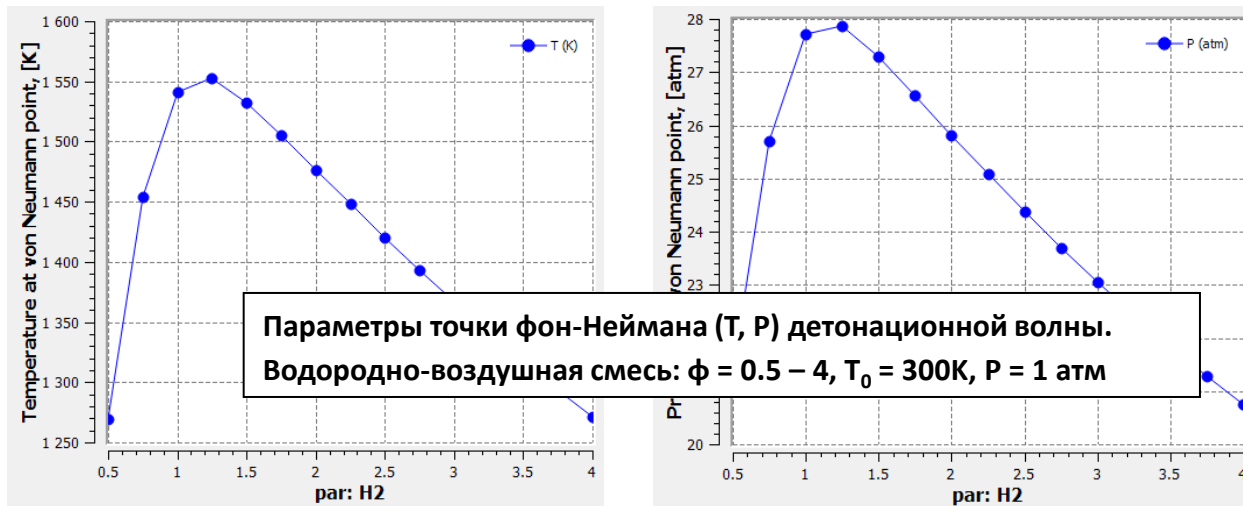


Список реакций в механизме [1] и интерфейс для загрузки механизма из KintechDB или файла CHEMKIN

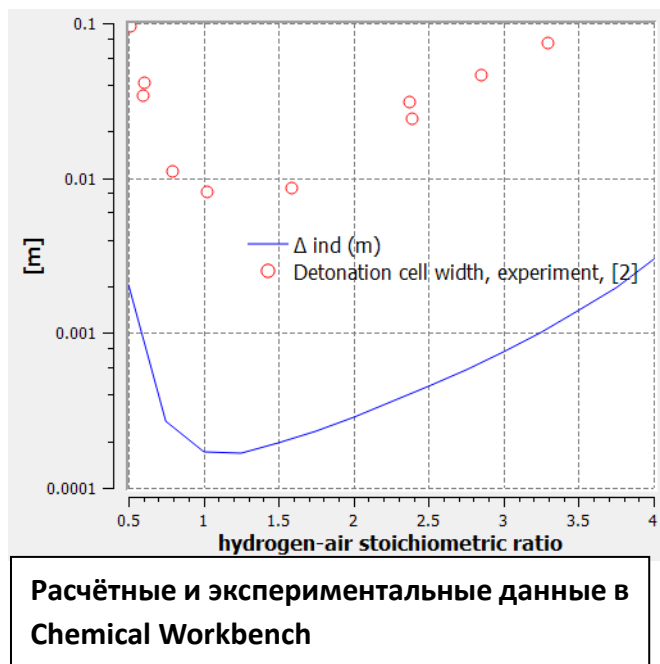
Исходную смесь задают во входном потоке реактора с составом $x\text{H}_2 + \text{O}_2 + 3,76\text{N}_2$ (в молях), где $x = 1 - 4$ ($\varphi = 0,5 - 4$). Начальная температура 300 К, давление в реакторе 1 атм

Результаты

Согласно модели идеальной детонационной волны ZND реагирующая смесь сжимается в вязком слое ведущей ударной волны, распространяющейся со скоростью Чэпмена-Жуге D_{CJ} . Это сжатие происходит на расстоянии порядка длины свободного пробега молекулярного движения и химических реакций не происходит - состав смеси не меняется. Параметры реакционной смеси сразу после сжатия за передней частью фронта - точка фон Неймана - вычисляются и могут быть использованы в дальнейшем за пределами Chemical Workbench



После нагревания в лидирующей ударной волне начальная смесь начинает реагировать и через некоторое время / расстояние, называемое временем задержки воспламенения / длиной индукции, начинается сильное тепловыделение с ускорением процесса сгорания. Длина зоны индукции сильно зависит от стехиометрического соотношения смеси и минимальна при стехиометрических условиях. На одном и том же графике внешние экспериментальные данные [2] построены и сохранены в проекте. Видно, что можно получить линейную корреляцию длины зоны индукции и размера детонационной ячейки (их отношение составляет приблизительно 13000 и сохраняется в широком диапазоне стехиометрических соотношений).



Следующие шаги

1. Повторите вычисления с помощью другого химического кинетического механизма. Сравните прогнозы.
2. Вычислите длину зоны индукции для различных топливных / начальных условий и сравните с имеющимися экспериментальными данными о размере детонационной ячейки.

Литература

1. Connaire, M. O., Curran, H J., Simmie, J. M., Pitz, W. J. and Westbrook, C.K., "A Comprehensive Modeling Study of Hydrogen Oxidation", International Journal of Chemical Kinetics, 36:603-622, 2004
2. G. Ciccarelli, T. Ginsberg, J. Boccio, C. Economos, K. Sato, and M. Kinoshita. Detonation cell size measurements and predictions in hydrogen-air-steam mixtures at elevated temperatures.
3. Combust. Flame, 99(2):212-220, 1994