

В. В. ФІЛОНОВ, Г. О. ВОРОПАЄВ**ЕНЕРГЕТИЧНІ ОСОБЛИВОСТІ КЛАСИЧНОЇ МОДЕЛІ СУМІШІ ДЛЯ ОЦІНКИ ПАРАМЕТРІВ ДЕТОНАЦІЇ В ОБМЕЖЕНОМУ ОБ'ЄМІ**

Наведено особливості оцінки параметрів детонації в обмеженому об'ємі з урахуванням кінетики узагальненої реакції горіння в контексті параметричної задачі максимізації одиничного реактивного імпульсу. Розрахунок характерних величин ударного фронту та безпосереднього стану середовища базуються на моделі суміші без урахування можливої морфологічної гетерогенності у вигляді об'ємних сил, що характеризують міжфазну взаємодію. Реагенти та продукти горіння розглядаються індивідуальними компонентами (з точки зору їх теплофізичних властивостей) та описуються єдиним полем швидкості, тиску та температури з відстежуванням матеріальних співвідношень. Загалом такий підхід безпосередньо для опису переносу середовища є розповсюдженим для такого типу задач, проте виникає певна незручність з точки зору розрахунку енергетичного виходу реакції, яка базується на тепломасообмінному члені (в загальному – дифузійний член) рівняння енергії для суміші. Це призводить до того, що в переважній більшості випадків необхідним є узгодження залежностей теплофізичних властивостей компонент (ізобарна/ізохорна теплоємність, ентальпія та ентропія). При цьому принципово відсутня можливість будь-яким чином впливати на енергетичний вихід реакції, що здебільшого призводить до значно більших прогнозних температур середовища у порівнянні з адиабатичними параметрами детонації. У роботі в першому наближенні запропонована модифікація, яка дозволяє враховувати енергетичний вихід реакції явним чином, та значною мірою спрощує вимоги щодо підготовки самоузгоджених функцій калоричного рівняння стану кожної із компонент. Для врахування кінетики реакції детонаційного горіння на основі співвідношення Арреніуса побудована модифікована функція швидкості прямої реакції, яка мультиплікативно враховує «турбулізацію» потоку, що все ще потребує обговорення. Запропоновані модельні співвідношення були імплементовані у вигляді користувачської моделі горіння в ANSYS CFX, та застосовувалися для попередньої оцінки одиничного детонаційного імпульсу в обмеженому просторі.

Ключові слова: детонація, дефлаграційно-детонаційний перехід (DDT), реактивна сила, імпульсна камера згоряння, рівняння енергії.

V. V. FILONOV, G. O. VOROPAIEV**ENERGY FEATURES OF THE CLASSICAL MIXTURE MODEL FOR ESTIMATING DETONATION PARAMETERS IN A LIMITED VOLUME**

The article presents the features of detonation parameters estimation in a limited volume taking into account the kinetics of the generalized combustion reaction in the context of the parametric problem of unit reactive impulse maximization. The calculation of the characteristic values of the shock front and the state of the medium are based on the mixture model without taking into account possible morphological heterogeneity in the form of volume forces characterizing interphase interaction. Reagents and combustion products are considered as individual components (in terms of their thermophysical properties) and described by a single field of velocity, pressure, and temperature with tracking of material relationships. In general, this approach to describing the transport of the medium is common for this type of problem, but there is a certain inconvenience in calculating the energy yield of the reaction, which is based on the heat and mass transfer term (diffusion term) of the energy equation for the mixture. This leads to the fact that in the vast majority of cases it is necessary to reconcile the dependencies of the thermophysical properties of the components (isobaric/isochoric heat capacity, enthalpy and entropy). In this case, there is basically no possibility to influence the energy yield of the reaction, which mostly leads to significantly higher predicted temperatures of the environment compared to the adiabatic parameters of detonation. The article suggests a modification that in the first approximation allows explicit consideration of the reaction energy yield and significantly simplifies the requirements for preparing self-consistent functions of the caloric equation of state of each component. To take into account the kinetics of the detonation combustion reaction, a modified direct reaction rate function is constructed on the basis of the Arrhenius relation, which multiplicatively takes into account the "turbulization" of the flow, which still needs to be discussed. The proposed model relations were implemented in the form of a custom combustion model in ANSYS CFX, and were used for preliminary evaluation of a single detonation pulse in a limited volume.

Key words: detonation, deflagration-detonation transition (DDT), reactive force, impulse combustion chamber, energy equation.

Вступ. Оцінка параметрів детонаційного процесу горіння має практичне значення у контексті проектування імпульсних реактивних двигунів. В цілому, оцінка параметрів детонації, особливо коли розглядається динаміка переходу від дефлаграції до детонації (DDT) після короткотривалої ініціації, є вивченою проблемою з точки зору моделювання [1 – 3]. Сучасні методи [4] та спеціалізовані інструменти [5] дозволяють як якісно, так і кількісно враховувати основні процеси, притаманні реагуючому потоку із інтенсивним (деякою мірою вибуховим) енерговиділенням. Проте для інженерної практики, особливо для задачі пошуку та оптимізації геометрії обмеженої камери згоряння, виникають суттєві проблеми, насамперед пов'язані з розрахунковими ресурсами. Тому все ще актуальною є розробка таких математичних наближень, які деякою мірою спрощують та універсальізують попередні оцінки вже для подальших детальних розрахунків.

Аналіз останніх досліджень. З точки зору газодинаміки та тепломасообміну задача переносу реагуючого середовища є найбільш повною з точки зору формалізму багатоконпонентного середовища і в загальному випадку потребує врахування особливостей не тільки силової взаємодії на контактній границі, але й масообміну за рахунок фазового переходу (одним із продуктів є вода) [1, 5]. Сучасна практика базується або на *спроценні задачі переносу (рівняння Ейлера)* та детальному кінетичному механізмі в симбіозі зі спеціалізованими підходами дискретизації високого порядку [6], або на застосуванні універсальних та спеціалізованих моделей горіння в *комерційних CFD пакетах* [4, 7]. В обох випадках у переважній більшості застосовується класичне наближення суміші, де безпосереднє енерговиділення за рахунок реакції горіння визначається завдяки балансу *ентальпії* реагентів та продуктів реакції. В такому випадку оцінка параметрів детонації (особливо температура та тиск) досить чутливі до поліномів калорійних параметрів, що суттєво обмежує можливості адаптації математичної мо-

делі горіння. Практика оцінки впливу на прогноз детонаційного процесу [8] показує, що необхідною умовою більш реального прогнозу температури (і також тиску в силу рівняння стану) є застосування каскаду елементарних реакцій замість узагальненої. Такі підходи є значною мірою затратними для параметричних оцінок.

Метою даної роботи є побудова відносно простого наближення для оцінки параметрів детонації з використанням концепції узагальненої реакції та модифікацією рівняння переносу енергії у вигляді об'ємного джерела з явним виходом енергії на одиницю маси палива. Наведені наближення використовуються для аналізу геометричної конфігурації напівобмеженої камери згоряння для максимізації одиночного імпульсу реактивної сили.

Постановка задачі. Оцінюється застосовність енергетичної модифікації класичної моделі суміші [9] для одностадійної (узагальненої) реакції окислення метану/пропану для оцінки параметрів ударної хвилі з урахуванням динаміки її розповсюдження. Розглядається формування та розвиток фронту горіння на основі простих функцій захвату монофронту на основі власної користувацької моделі детонаційного горіння в пакеті *ANSYS CFX*. Виконано перше наближення щодо геометричної конфігурації проточної частини імпульсної камери. Задача розглядається в фізичних координатах. Термодинамічний стан компонентів відповідає ідеальному газу, суміш вважається також ідеальною. Процеси, пов'язані з переносом середовища, приймаються необоротними.

Математична модель. Розглядається багатокомпонентне середовище, яке вважається рівноважним з силової, механічної та енергетичної точки зору. Тобто задача переносу описується системою нестационарних рівнянь Рейнольдса, які записуються із використанням властивостей суміші. Таким чином, використовується одне рівняння нерозривності з нульовою правою частиною, 3 (або 2 в 2D постановці) рівняння збереження імпульсу, та $(n-1)$ транспортне рівняння переносу концентрації (n – кількість компонент, останнє рівняння характеризує матеріальну рівність). Рівняння збереження повної енергії записується також для суміші. Вищезазначена система доповнюється системою алгебраїчних та трансцендентних співвідношень для каскаду елементарних реакцій, що, в загальному випадку, разом із рівняннями збереження (переносу) утворює гібридну систему, де $(n-1)$ концентраційне співвідношення є жорсткими з позиції чисельних методів. Вищенаведена постановка є відомою [9, 10] і доступна в переважній більшості CFD пакетів, тому детальний формалізм у даній роботі не розглядається. Додатково зауважимо, що не враховуються і сили взаємодії між кожною із компонент, що безумовно суттєво спрощує постановку, проте такий спосіб є розповсюдженим для даного типу задач [3 – 5].

Класичне рівняння збереження повної енергії (з урахуванням добавки в контексті вихрової в'язкості) для суміші може бути представлено як:

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} E) = \nabla \cdot \left[\left(\lambda + \frac{\partial h}{\partial T} \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \nabla T + \underbrace{\left(\frac{\partial h}{\partial P} \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \nabla P}_{\text{дросилування}} \right] + \underbrace{\sum_{i=1}^{N_c} \nabla \cdot \left[h_i \left(\left\{ \frac{\lambda}{c_p} \right\}_i + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \nabla Y_i \right]}_{\text{енерговиділення (II)}}, \quad (1)$$

де $\vec{U}$ – швидкість суміші; E – повна питома енергія суміші; Y_i – концентрація реагентів/продуктів; N_c – кількість компонент в суміші; μ_t та Pr_t – вихрова в'язкість та турбулентне число Прандтля, яке за замовчуванням прийнято рівним 0.9.

Саме дифузійний член (II) і визначає тепловиділення за рахунок горіння та суттєвим чином залежить від функціональної залежності ізобарної теплоємності від температури. Причому поліноми для теплоємності (а також ентальпії та ентропії) повинні бути узгодженими між кожними з компонент, що для горючих матеріалів є дещо синтетичним. Річ у тому, що технічне визначення залежності калориметричних параметрів від температури для горючих величин суттєвим чином ускладнено температурою samozapalovannya (яка знаходиться в межах 700 ÷ 900 K для газоподібних речовин, що розглядаються). Тобто інформація відносно частини теплофізичних властивостей палив фізично екстраполюється застосовуючи поняття питомого тепловиділення одиниці маси палива. Такий спосіб хоч і є розповсюдженим, проте він не дозволяє простим чином «керувати» в математичній постановці саме цією величиною. Альтернатива полягає в заміні (II) на об'ємне джерело з явним використанням питомої теплоти згоряння палива, за аналогією з фундаментальною теоретичною моделлю Зельдовича – Неймана – Дерінга.

Розглянемо інтегральну форму енерговиділення за рахунок реакції окиснення, яка може бути представлена наступним чином:

$$Q_\Sigma \left[\frac{Bm}{m^3} \right] \sim \sum_{i=1}^N \left(\int_{T_{ref}^0}^T c_p(T) dT \right)_i n_i \mu_i R_k^i \Rightarrow \underbrace{q_{fuel} \mu_{fuel}}_{q_{fuel}^\mu} n_{fuel} R_k(T) \Rightarrow q_{fuel}^\mu R_k(T) \rightarrow q_{fuel}^\mu \underbrace{\frac{\partial R_k(T)}{\partial T}}_{\text{лінеаризований член}} T, \quad (2)$$

де $R_k(T)$ – швидкість реакції горіння; q_{fuel}^μ – питома теплота згоряння газоподібного палива, Дж/кг; μ_i – млярна маса компонента; n_i – стехіометрична постійна в реакції окиснення.

Лінеаризована форма необхідна лише з технічної точки зору для прискорення конвергенції при імплементації в CFD пакет. Сумарне об'ємне джерело енергії Q_Σ в рівнянні збереження повної енергії задається у вигляді *додаткового терму*. У постановці моделі суміші [10], дифузійний член (II) може бути «виключений» двома способами: перший базується на введенні аналогічного терму, але протилежного знаку, другий – шляхом введення концепції «універсальних» властивостей газу. Перший спосіб потребує спеціального контролю *солвера* (дисбалансів енергії), оскільки дискретизація та концептуалізація розрахунків «базового» терму вихідного рівняння, строго кажучи, відрізняється від еквівалентного об'ємного джерела. Тому в першому наближенні застосовується універсалізація поняття теплоємності для суміші, яке може бути сформоване так: «необхідно задати деякі «спільні» властивості компонент, які б гарантували тотожність нулю енерговиділення (II)». Свого роду це є деякою абстракцією з теплофізичної точки зору, яка досить легко вирішується шляхом реалізації у власних розрахункових інструментах. У подальшому аналізі середня ізобарна теплоємність суміші приймається рівною $2500 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$, а молекулярне число Прандтля 0.72 , що для заданої залежності динамічної в'язкості цілком визначає теплопровідність. Оскільки

$$\sum_{i=1}^{N_c} Y_i \equiv 1.0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{N_c} \nabla Y_i \equiv 0,$$

стандартний член енерговиділення (II) набуває нульового значення.

Безпосередньо розрахунок швидкості прямої узагальненої реакції горіння базується на співвідношенні Арреніуса, яке було модифіковано до наступної параметричної форми:

$$R_k(T^*) = \underbrace{A_{xim} \left(\frac{T^*}{T_0} \right)^\alpha \left(\frac{P}{P_0} \right)^\beta \exp \left(-\frac{E_a}{RT^*} \right) [\tilde{Y}_{fuel}]^{n_1} [\tilde{Y}_{ox}]^{n_2}}_{xim} \underbrace{\left(\frac{\mu_m \varepsilon}{\rho k^2} \right)^{n_t}}_{турб} B_d(T_{min}, T_{max}), \quad (3)$$

де, T^* – визначальна температура; A_{xim} – константа реакції; E_a – енергія активації, Дж/моль; $\tilde{Y}_{fuel}$, $\tilde{Y}_{ox}$ – безрозмірна мольна концентрація палива та окиснювача; μ_m – молекулярна в'язкість; k , ε – кінетична енергія турбулентності та її питома дисипація; n_1 та n_2 – порядки узагальненої реакції; α , β та n_t – емпіричні константи.

Функція $B_d(T_{min}, T_{max})$ (4) характеризує затухання реакції в залежності від нижньої межі (приймається рівною температурі самоспалаху), T_{max} – верхня модельна межа (приймається рівною 5000 К). Обрані межі, як показують експериментальні дослідження [11], є цілком прийнятними, оскільки мінімальна температура джерела ініціації (сферичної форми) є принаймні у два рази більшою за температуру самоспалаху (наприклад, для метану ці значення дорівнюють 1473 К та 650 К відповідно), а обмежуюча температура є більшою, ніж теоретично можлива – адіабатична температура детонації:

$$B_d(T_{min}, T_{max}) = \frac{1}{4} \left[1 - th \left(\Omega \frac{T - T_{min}}{\Delta T_{ref}} \right) \right] \left[1 - th \left(\Omega \frac{T - T_{max}}{\Delta T_{ref}} \right) \right]. \quad (4)$$

Варто відзначити, що функція (4) введена не лише для верхнього та нижнього обмеження швидкості реакції, але й виконує роль часткового подолання «невизначеності» в пристінковій зоні ε/k^2 , що може призводити до нефізичної ініціації горіння через суттєві градієнти швидкості потоку біля стінки.

Взагалі ідея, що покладена в модифіковане співвідношення Арреніуса, полягає в простому поєднанні *моделі скінчено-швидкісної хімічної реакції з концепцією вихрової дисипації*, що в загальному є незалежними наближеннями для моделювання горіння [10]. Іноді для подібного роду наближень застосовують додаткове транспортне рівняння абстрактного пасивного скаляру, який, як правило, характеризує кількість горючого матеріалу (наприклад, співвідношення Магнуссена – Арреніуса [12]). Проте існуючі моделі, як правило, використовують *предикативний (або відсічний) механізм* визначення швидкості хімічної реакції, що в загальному не є прийнятним для ударних процесів. У запропонованому варіанті модифікації наявність турбулентності виконує роль підсилення хімічної реакції. Покладений зміст в

$$\left(\frac{\mu_m \varepsilon}{\rho k^2} \right)^{n_t}$$

все ще потребує обґрунтування, і в першому наближенні може інтерпретуватися як чинник, стимулюючий зародження *детонаційних чарунок*.

Динамічна в'язкість для суміші оцінюється за допомогою *залежності Сазерленда* (коефіцієнти прийняті в демонстраційних цілях в рамках даної роботи):

$$\mu_m = a_s \frac{\sqrt{T}}{1 + T_s/T}, \quad a_s \approx 1.67 \cdot 10^{-6}; \quad T_s \approx 170.7. \quad (5)$$

В якості замикаючої моделі турбулентності може використовуватися будь-яка *двопараметрична URANS модель вихрової в'язкості*.

Варто відзначити, що застосування узагальненої реакції для оцінки параметрів детонації можливо лише тоді, коли відповідні ефективні константи (окрім модельних співвідношень) визначені за допомогою експерименту або ж аналітично адаптовані для відповідних умов.

Валідація запропонованої модифікації (FRC_EM). Для демонстрації застосовності запропонованої модифікації фактично моделі *скінченної кінетики (Finite Rate Chemistry – FRC, EM – Energy Modification)* [10] на основі одностадійної прямої реакції виконана оцінка одиничного імпульсу на основі експериментальних досліджень для пульсаційного аеродинамічного реактивного двигуна [13]. Як правило, детальну специфікацію такого типу експерименту (в плані практичних газоподібних палив і їх детонації) отримати важко, тому деякі параметри прийняті на основі досвіду авторів.

Розглядається *стехіометрична суміш пропану (C_3H_8) та кисню (O_2)* за умов, що є близькими до нормальних (абсолютний тиск – 1 атм., температура – 293 К). Розглядається геометрична конфігурація без урахування *шнекоподібної спіралі Щолькіна* для ініціації гетерогенної детонації, що дозволяє виконати оцінки в осесиметричній постановці. Загальний вигляд геометрії та її дискретизації показано на рис. 1.

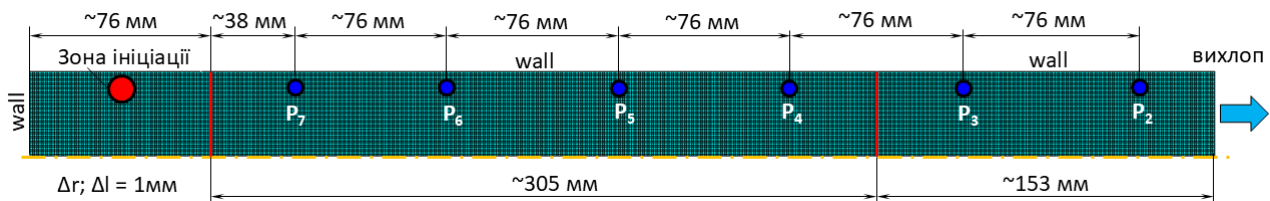


Рис. 1. – Спрощена розрахункова область (проточна частина камери згоряння) [13].

Параметри ініціації в розрахунковій моделі приймалися наступними. Оскільки в [13] наведені лише інтегральні характеристики тепловиділення ініціатора для 1-го імпульсу ($E_{init} = 13.5$ Дж/імпульс) без уточнення його геометричних та таймінгових характеристик, то оцінка в моделі відбувається у вигляді еквівалентного джерела з наперед заданою температурою T_{init} . Таким чином, характерний геометричний розмір ініціатора можна знайти, використовуючи співвідношення (6), де покладено, що ініціатор є «тороподібним» внаслідок двовимірності постановки. Безпосередня ініціація призводить до локального прогріву середовища в області з характерним радіусом r_{init} , а вже потім до розвитку перехідного процесу горіння:

$$r_{init} = \sqrt{\frac{E_{init}}{2\pi^2 \rho c_p (T_{init} - T_0) R_0}}, \quad (6)$$

R_0 – радіус проточної частини (36.2 мм).

Приймаючи температуру ініціації рівною 800 К/1500 К/2500 К, радіус r_{init} оцінюється в 3.4 мм/2.2 мм/1.6 мм відповідно. Нижня температура ініціатора приймається близькою до температури самозапалювання суміші.

Для оцінки параметрів імпульсу тиску в місцях датчиків P_{2-7} (рис. 1) для співвідношення одностадійної хімічної кінетики (3) приймалися наступні значення коефіцієнтів:

- Константа реакції $A_{xim} = 9.1 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$, енергія активації $E_a = 104.5 \text{ кДж/моль}$ ([11]).
- Константи впливу тиску та температури: $\alpha = 1.77$; $\beta = -0.2$ (за аналогією поправки для швидкості розповсюдження полум'я, строго кажучи, потребують узгодження).
- Порядок реакції n_1, n_2 приймаються рівними 0.1 та 1.65 відповідно.
- Розглядається два значення показника n_t степені для терму турбулентного «підсилення»: 0.25 (приймається за аналогією *наближення Магнуссена*), та 0.75 (за аналогією визначення безрозмірного масштабу турбулентності).
- Нижня межа температури реакції (T_{min}), яка здатна самопідтримуватися, приймається рівною 745 К, а верхня границя обмежена значенням в 5000 К, що в переважній більшості є нижчим за теоретичне значення.
- Визначальна температура T^* для оцінки швидкості реакції може прийматися, виходячи із термодинамічних міркувань $T^* = T$, або енергетичних. У такому випадку, вважаючи, що кожен компонент та їх суміш є ідеальним газом, опорна температура визначається з урахуванням повної кінетичної енергії потоку $T + U^2/2c_p + k/c_p$.

Додатково виконані оцінки з використанням *стандартної моделі FRC* з параметрами хімічної кінетики, що відповідають факельному горінню пропану [11] ($A_{xLM} = 8.6 \cdot 10^{11} \text{ c}^{-1}$; $E_a = 125.4 \text{ кДж/моль}$).

Параметри ударної хвилі в першому наближенні оцінювалися із використанням поняття функції «схемного» розриву $\psi(t, r, l)$, що характеризує перехід дискретизації адвекції від другого на перший порядок апроксимації в області умовного стрибка густини/тиску. Тоді основні розрахункові величини детонаційної хвилі можуть бути встановлені, виходячи зі співвідношень (7), які застосовні лише тоді, коли в розрахунковій області наявний одиничний ударний фронт.

$$l_D = \max[l \cdot \psi(t, r, z)]; \phi_D = \max[\phi \cdot \psi(t, r, z)]; \Delta l = \pi \left(\max[r \psi(t, r, z)] \right)^{-2} \int_V \phi(t, r, z) dV, \quad (7)$$

де l_D – максимальна геометрична позиція ударної хвилі; ϕ_D – значення скаляра в ударному фронті (наприклад температур, тиску); δL – наближена товщина ударного фронту (строго кажучи, лише для оцінки порядку величини через наявність числової дифузії).

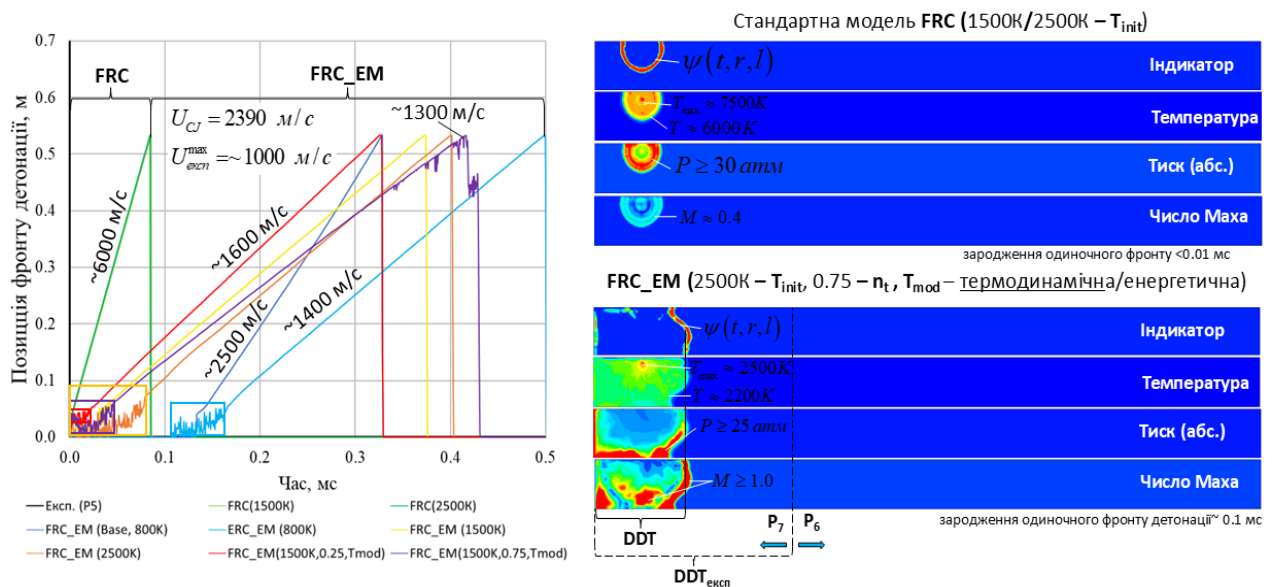


Рис. 2 – Результати оцінки позиції ударної (детонаційної) хвилі для різних варіантів коефіцієнтів та температури ініціації.

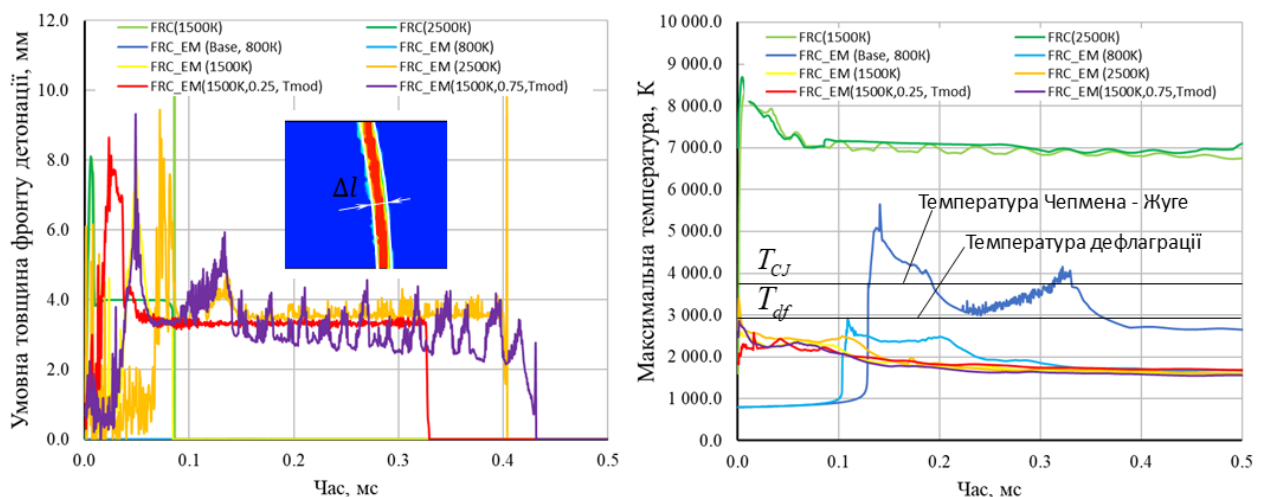


Рис. 3 – Результати оцінки характерної товщини (порядок) та температури ударної (детонаційної) хвилі для різних варіантів коефіцієнтів і температури ініціації.

Характерний розмір розрахункової чарунки дискретизації складає 1мм, а крок інтегрування за часом 0.5мкс, що забезпечує значення CFL не вище 0.5. У даному випадку адаптація розрахункової сітки не використовувалася, хоча є характерною (і в деяких випадках невід’ємною частиною) для такого типу задач. Використовується другий порядок апроксимації *адвективного члену* з переключенням на *протипотокову схему (upwind)* в місці розриву. Використовується другий порядок апроксимації за часом. Застосовувалася *SST модель турбулентності* без урахування *ламінарно-турбулентного переходу*.

На рис. 2 та рис. 3 наведено основні оціночні параметри фронту ударної хвилі (позиція l_D , характерна товщина та температура) для різних наборів параметрів у співвідношенні (3) та початкової температури ініціації T_{init} .

Отримані результати є досить показовими у порівнянні зі стандартною моделлю скінченної хімічної кінетики (FRC) із використанням одностадійної (узагальненої реакції). Запропоновані модифікації рівняння енергії (2) та швидкості прямої хімічної реакції (3) суттєво поліпшують прогнози детонаційної хвилі: максимальну температуру та тиск, а також швидкість розповсюдження ударної хвилі. Фактично при застосуванні стандартної FRC для температур ініціації 1500 K та 2500 K детонація відбувається практично миттєво, тобто дефлаграційно-детонаційний перехід (DDT) відсутній. При цьому швидкість розповсюдження ударної хвилі за індикаторною оцінкою (7) складає близько 6000 м/с, що більше ніж в два рази перевищує теоретичну швидкість детонації (~ 2390 м/с) для *стехіометричної пропан – кисневої суміші*. В цілому, такі результати узгоджуються з оцінками [8], де зроблений висновок про непридатність застосування FRC з одностадійною реакцією через суттєву переоцінку параметрів детонації. Варто відзначити, що для класичної моделі FRC розглядався і варіант з низькою температурою ініціації (800 K), що не породжує дефлаграційне горіння, а лише відтермінує детонацію на $1 \div 1.5$ мс з практично незмінною динамікою та її параметрами у порівнянні із варіантами ініціації в 1500 K та 2500 K. При застосуванні FRC_ЕМ отримані результати значно краще узгоджуються з експериментом [13]. По перше, для різних параметрів температури ініціації детонація відбувається не миттєво, а через DDT з різною геометричною шириною. Тобто детонація відбувається фронтом у повний поперечний переріз на деякому віддаленні від зони ініціації. Причому з графіків рис. 2 видно, що початкове розповсюдження фронту горіння має невисоку швидкість з суттєвими «осциляціями» позиційної координати. Швидкість розповсюдження в такому випадку є нижчою за теоретичну (параметри Чепмена – Жуге), проте значно краще узгоджується з експериментальною [13], що знаходиться в межах від 500 м/с до 1100 м/с. Варто відзначити наступну особливість: при застосуванні *немодифікованого рівняння Арреніуса* з параметрами [11] ($A_{xlm} = 9.1 \cdot 10^{11} \text{ c}^{-1}$; енергія активації $E_a = 104.5 \text{ кДж/моль}$), які підібрані для детонаційного режиму горіння, оціночна (FRC_ЕМ) швидкість розповсюдження ударної хвилі є близькою до теоретичної (рис. 2, варіант FRC_ЕМ (Base, 800 K)).

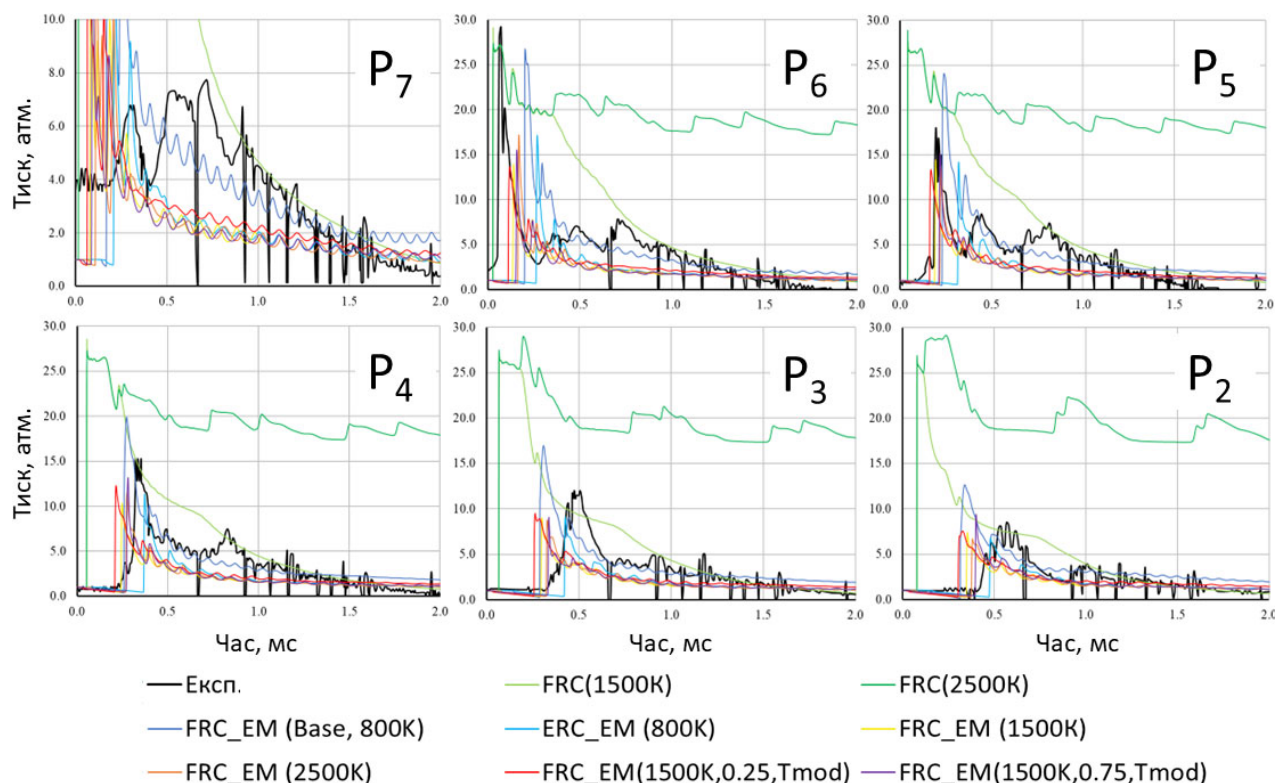


Рис. 4 – Порівняння експериментальної та розрахункової динаміки профілів тиску при утворенні одиничного імпульсу.

З точки зору енергетичного виходу (рис. 3), максимальна температура (при застосуванні FRC_ЕМ) на початок розвитку детонації в цілому є сумірною з параметрами Чепмена – Жуге ($T_{CJ} \sim 3800$ K) з подальшим зменшенням під час розширення до значень нижчих за оцінку температури дефлаграції ($T_{df} \sim 2900$ K). Прогноз із застосуванням FRC демонструє значно більші значення температури, причому не лише максимальної, але й сере-

дною в області горіння (більше 6000 K).

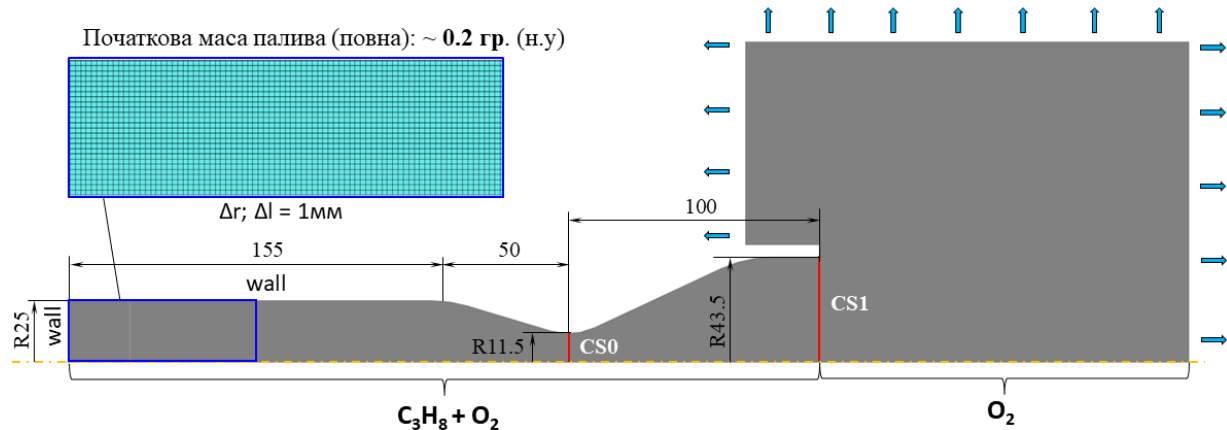


Рис. 5 – Базова геометрична конфігурація та її дискретизація.

На рис. 4 наведено порівняння експериментальних та розрахункових часових профілів тиску для різних розрахункових варіантів. Модифікації, що були запропоновані для рівняння енергії та одностадійної хімічної кінетики, суттєво поліпшили прогностичні властивості утворення детонаційної хвилі у порівнянні зі стандартним наближенням FRC. Енергетична оцінка температури (з урахуванням кінетичної енергії потоку) в цілому призводить до більш низького порогу активації інтенсивного горіння. Показник степені в турбулентному члені (3) визначає «ширину» переходу від дефлаграції до детонації.

Зважаючи на наявні невизначеності в параметрах ініціації, а також застосування осесиметричної постановки (еквівалентність зони підпалу) в першому наближенні запропоновані модифікації можуть застосовуватися для концептуальних напрацювань щодо пошуку та оптимізації геометрії камери згорання.

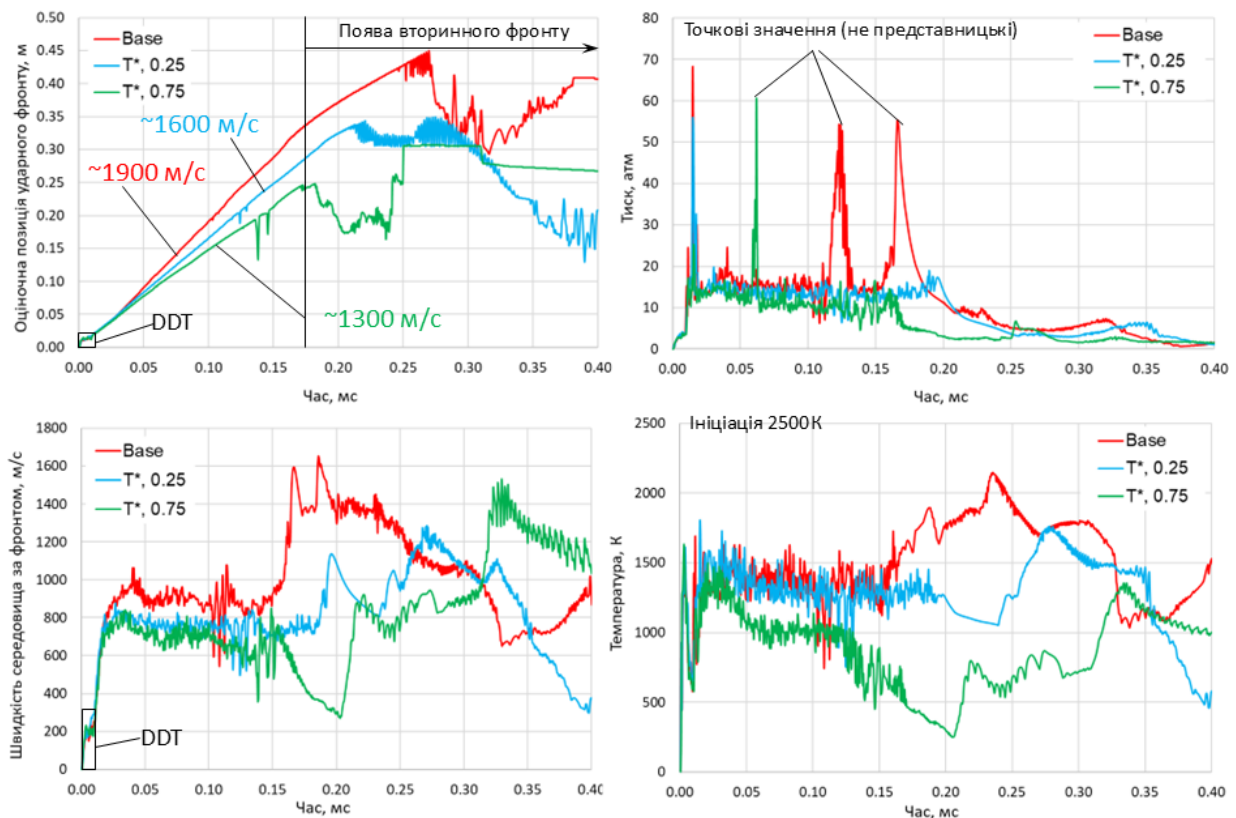


Рис. 6 – Основні параметри детонаційного фронту для різних розрахункових варіантів (T^* – варіант опорної температури з урахуванням кінетичної енергії осередненого потоку).

Пре-концептуальна оцінка геометрії детонаційної камери згорання базується на запропонованому підході (FRC_EM) з коефіцієнтами, що прийняті при валідації (для однозначності: опорна температура термодинамічна, показник степені в турбулентному члені – 0.75). Параметри налаштування розрахунків також аналогічні валідації. Базова геометрична конфігурація, що стала початковою точкою при аналізі, наведена на рис. 5. Розглядається пропан-киснева стехіометрична суміш. Основною метою пре-концептуальної оцінки є пошук опти-

мальних геометричних параметрів для максимізації параметрів одиничного імпульсу.

Радіус області ініціації приймається рівним 5 мм з температурою 2500 K, що задається через початковий стан (фактично безінерційне збурення температурою). Вважається, що заповнення камери згорання є ідеальним, тобто «границя» суміші $C_3H_8 + O_2$ та O_2 відповідає вихідному перерізу CS1. На рис. 6 наведені основні параметри детонаційного фронту, які оцінені з урахуванням співвідношень (7). Під базовим варіантом «Base» розглядаються налаштування за замовчуванням, що наведені на початку (за результатами валідації).

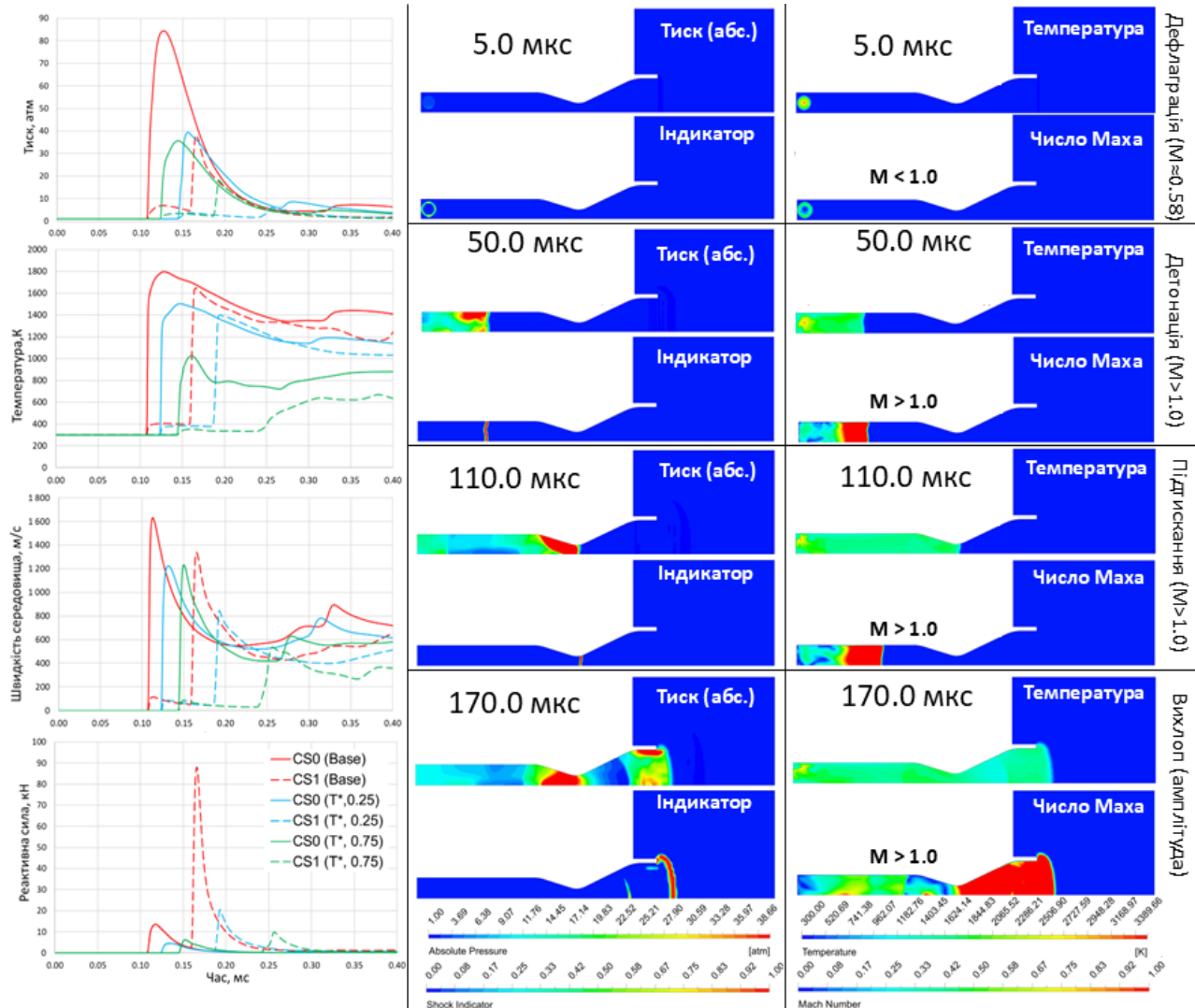


Рис. 7 – Результати оцінки параметрів одиничного імпульсу для базової геометричної конфігурації в обраних поперечних перерізах CS0 та CS1.

Безпосередньо основні характеристики одиничного імпульсу в референтних поперечних перерізах CS0 та CS1 наведені на рис. 7, де для конфігурації «Base» епізодично показані поля тиску, індикатор-функції $\psi(t, r, l)$, температури та локального числа Маха. Отримані результати показують, що для кожного із варіантів відбувається утворення стійкої детонаційної хвилі, приблизно в 30–40 мм від місця ініціації (число Маха стає більшим за одиницю). Тобто умовна зона дефлаграційно-детонаційного переходу складає 1 калібр, що принаймні для діаметра в 50 мм дозволяє позбутися локальної зони «підтискання», а навпаки камеру згорання конфігурувати у вигляді плавного розширення.

Температура вихлопу в середньому нижча за 1600 K (пікове значення може сягати 1800 K), що в цілому дозволяє застосовувати вже відомі технічні рішення для охолодження вихідного сопла. Пікове значення реактивної сили в 90 кН досягається при використанні базових налаштувань моделі FRC_EM, що запропонована в даній роботі. В інших випадках реактивна сила є значно меншою і не перевищує 20 кН. Така суттєва різниця в кінцевому результаті пояснюється більш низькою термодинамічною температурою (через наявність кінетичної добавки середнього потоку в опорному значенні T^*), що здатна підтримувати реакцію. У цих випадках ударна хвиля все одно утворюється, але з параметрами недостигненої детонації, яка є граничною до дефлагації (термодинамічна інтерпретація, рис. 8).

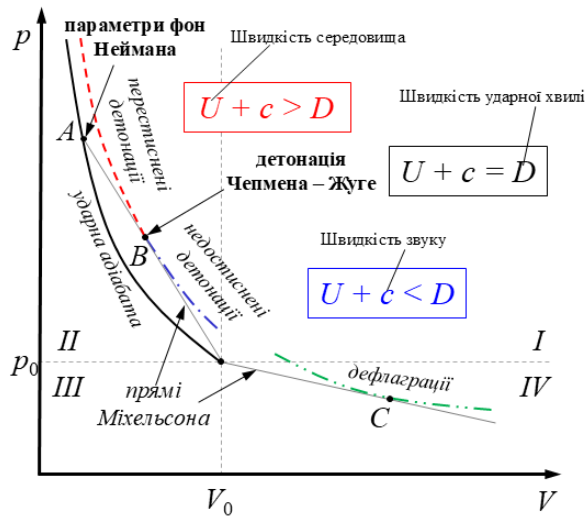


Рис. 8 – Термодинамічна інтерпретація параметрів дефлагації-детонації.

геометричні конфігурації із співвідношенням площі поперечного перерізу вихідного сопла і умовної зони DDT (ступінь розширення): ~ 2.9 , ~ 7.7 та 16.0 (характерне значення для сопел, що працюють у щільних шарах атмосфери землі).

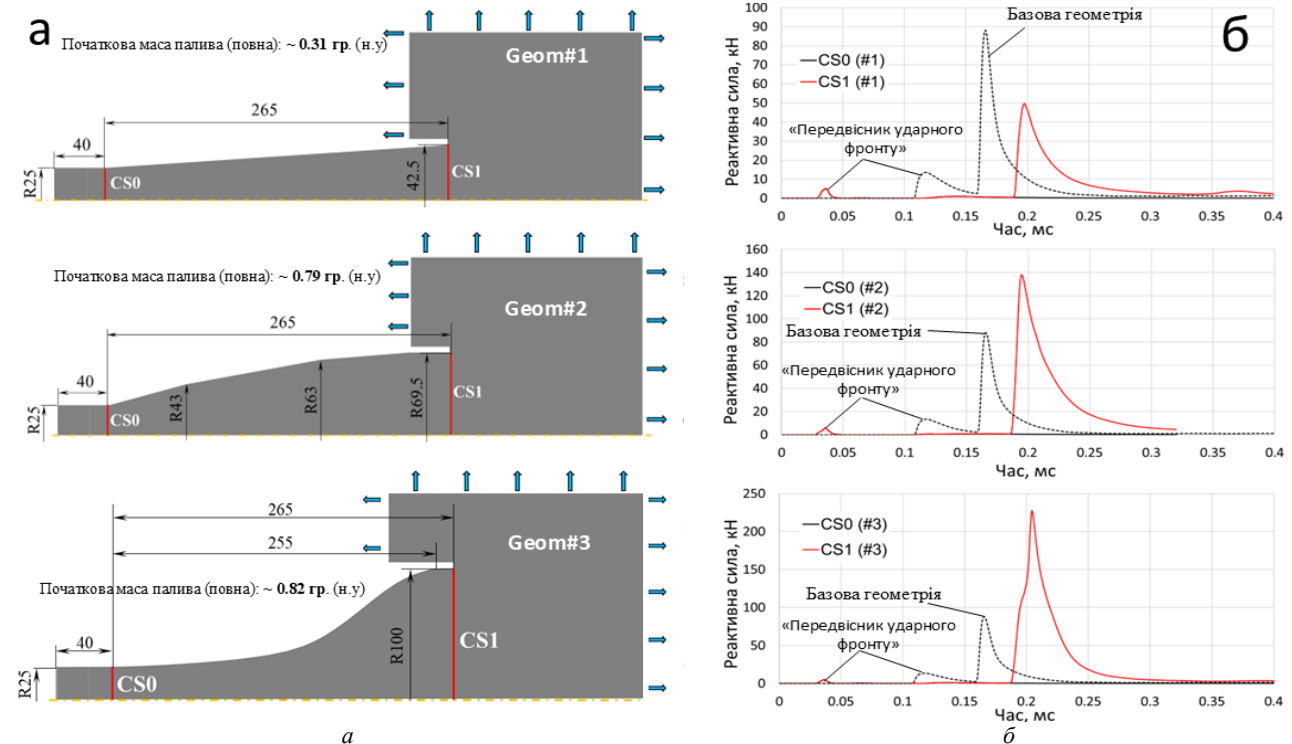


Рис. 9 – а – Основні геометричні характеристики проточної частини камери згоряння; б – отримані одиничні імпульси на пропан-кисневій стехіометричній суміші.

Результати оцінки параметрів одиничного імпульсу наведені на рис. 9, б. Поступове збільшення площі поперечного перерізу вздовж проточної частини каналу в сторону виходу призводить до підвищення параметрів одиничного імпульсу, проте швидкість розповсюдження ударної хвилі зменшується (видно по зміщенню амплітуди піку відносно базової геометричної конфігурації). Аналіз отриманих результатів показав, що збільшення реактивної сили для обраних геометричних конфігурацій носить в першу чергу екстенсивний характер, тобто визначається збільшенням площі та кількості маси палива (тобто енергетичного запасу на одиницю імпульсу). Для базової геометрії в момент «виходу» амплітуди реактивної сили, пікове значення тиску та швидкості продуктів складає ~ 40 атм. та близько 1300 м/с відповідно (пікова температура – 1600 К). На момент релаксації імпульсу до 1% від амплітуди сили, швидкість середовища все ще залишається суттєвою (близько 500 м/с), проте в декілька десятків разів зменшується густина через падіння тиску до 1.5 атм. (температура вихлопу – 1300 К). Для геометрії **Geom#1**, яка в сенсі початкової маси палива та за ступенню розширення є близькою до

У загальному, отримані параметри детонаційної хвилі є нижчими за теоретичні (детонація Чепмена – Жуге: тиск – 33 атм.; температура – ~ 3900 К; швидкість детонаційного фронту – ~ 2400 м/с) для заданих початкових параметрів.

Отримані результати першого наближення для базової геометричної конфігурації (рис. 5) дозволяють виконати певні уточнення проточної частини умовної камери згоряння задля максимізації параметрів одиничного імпульсу. Приймаючи, що діаметр камери залишається незмінним (50 мм), розглянуто три спрощені геометричні варіанти, що враховують наявність переходу до детонації в межах перших 40 – 50 мм від області ініціації і досягненні одиниці числа Маха руху продуктів згоряння за умовним детонаційним фронтом. Основна ідея в цих випадках полягає у «стимулюванні» прискорення шляхом розширення поперечного перерізу надзвукового потоку. Основні геометричні характеристики наведені на рис. 9, а. Розглядаються

базової вищезазначені параметри наступні: 20 атм./800 м/с/1300 К – пік імпульсу; 3.6 атм./450 м/с/1200 К – падіння до 1 % від амплітуди реактивної сили. Для **Geom#2** отримані такі величини: 22.5 атм./1000 м/с/1250 К та 5 атм./450 м/с/1000 К відповідно. Геометрична конфігурація **Geom#3** характеризується такими параметрами: 26.2 атм./915 м/с/1250 К та 3.5 атм./280 м/с/1100 К при релаксації імпульсу.

З практичної точки зору це означає, що оптимізація геометрії камери згоряння і проточної частини за можливості повинна призводити і до інтенсифікації процесів горіння, тобто організовувати перестиснену детонацію (рис. 8). Це в свою чергу потребує застосування спеціальних засобів (наприклад, *шнеку типу Щьолкіна*, резонаторів) та більш тонкого (з точки зору власних параметрів) калібрування та налаштування.

Окремо слід зауважити, що за результатами розрахунків в усіх випадках наявний так званий «передвісник» ударного фронту, що проявляється як реактивна сила невеликої амплітуди перед основним імпульсом. Однозначно встановити, з чим це пов'язано досить складно (наприклад особливості конвергенції за масою в системі із рівнянь переносу з ефектом подібним до «теплової втечі»). В експериментальних дослідженнях [13] на профілях тиску також видна наявність невеликих збурень перед основним імпульсом, проте такі ефекти авторами не обговорюються. Узагальнюючі параметри одиночного імпульсу, що оцінені для різних конфігурацій геометрії з використанням запропонованої моделі **FRC_EM**, наведені в табл. 1.

Таблиця 1 – Усереднені та узагальнені параметри одиночного імпульсу для різних геометричних конфігурацій

Номер експерименту	Початкова кількість палива, гр.	Умовна затримка, мкс	Амплітуда імпульсу, кН	Орієнтовна ширина імпульсу, мкс	Приведене значення на 1 Гц, Н/Гц	Режим*
Базова конфігурація	0.20	158.0	86.0	~140.0	~ 2.1	Детонація
Geom#1	0.31	189.0	48.0	~ 160.0	~ 1.6	Детонація
Geom#2	0.79	186.0	137.0	~ 160.0	~ 4.4	Детонація
Geom#3	0.82	187.0	220.0	~ 160.0	~ 5.9	Детонація
* параметри ініціації обрані таким чином, щоб мінімізувати час затримки переходу до детонації (2500 К, та радіус збурення 5 мм). В практичних задачах спосіб ініціації горіння є суттєвою складовою у визначенні технічного періоду одиночного циклу (продувка/наповнення, ініціація, утворення та вихід імпульсу)						

Перспективи подальших досліджень. Автори виділяють декілька основних напрямків, які пов'язані з концептуалізацією та реалізацією математичної моделі, а також безпосередньо прикладне значення. Щодо першого напрямку, то вбачається перспективною побудова спеціального «більш фізичного» непридикативного індикатора інтенсифікації хімічної реакції за рахунок турбулентності, можливо із застосуванням спеціального рівняння переносу. Також слід зазначити, що перехід на каскадні реакції (прямі та зворотні) та схеми дискретизації високого порядку по простору скоріше за все потребуватимуть розробки спеціального коду, оскільки можливості комерційних пакетів є обмеженими. Під другим напрямком розуміється розробка автоматизованих процедур оптимізації геометричних параметрів камери згоряння шляхом вирішення газодинамічних оптимізаційних задач, що в перспективі суттєво прискорить проектування відповідних технічних рішень, та конкретизацію тих параметрів, які повинні визначатися натурними дослідженнями.

Висновки. Таким чином, у даній роботі представлено перше наближення для поліпшення прогностичних властивостей скінченної-хімічної моделі горіння (FRC) на основі одностадійної прямої реакції. Для цього запропонована модифікація рівняння переносу енергії, в якій член масо-енергообміну замінюється на явне об'ємне джерело енергії виходу реакції горіння. Додатково запропоновано мультиплікативний спосіб адаптації співвідношення швидкості реакції, що враховує турбулізацію потоку, що дозволяє оцінювати також область дефлаграційно-детонаційного переходу. Отримана розрахункова модель (FRC_EM) дозволяє більш якісно та кількісно прогнозувати параметри детонації, що підтверджується відповідними валідаційними оцінками для пропан-кисневої стехіометричної суміші. Запропоноване наближення FRC_EM використане для пре-концептуальної оцінки детонаційної камери згоряння, отримані параметри одиночного імпульсу реактивної сили, що підтвердили її застосовність насамперед для швидкого параметричного аналізу.

Список літератури

1. Zhao W., Deiterding R., Cai X., Liang J., Yang X., Sun M. Flame acceleration and detonation transition in premixed and inhomogeneous supersonic flows // Journal of Fluid Mechanics. – 2024. – 1001:A36. DOI:10.1017/jfm.2024.812.
2. Mikoshiba K., Sardeshmukh S. V., Stephen D. Heister, Impulse generated from detonation waves in non-premixed and partially premixed reactants // Applications in Energy and Combustion Science. – 2024. – V. 18. DOI: 10.1016/j.jaecs.2024.100264.
3. Xiao Liang, Rui-li Wang. Verification and validation of detonation modeling // Defence Technology. – 2019. – Volume 15. – Issue 3. – pp. 398 – 408. DOI: 10.1016/j.dt.2018.11.005.
4. Shamsadin Saeid M. H., Ghodrat M. Numerical Simulation of the Influence of Hydrogen Concentration on Detonation Diffraction Mechanism // Energies. – 2022. – 15. 8726. DOI: .3390/en15228726.
5. Wandong Zhao, Caizhi Fan, Ralf Deiterding, Xiaokang Li, Jianhan Liang, Xiong Yang. A new rapid deflagration-to-detonation transition in a short smooth tube // Physics of Fluids. – 2024; 36 (3): 036104. DOI: 10.1063/5.0191500.

6. Romick Christopher M., Aslam Tariq D. High-order shock-fitted detonation propagation in high explosives. – United States: N. p., 2016. Web. DOI: 10.1016/j.jcp.2016.11.049.
7. Fotis Rigas, Spyros Sklavounos. Experimentally validated 3-D simulation of shock waves generated by dense explosives in confined complex geometries // *Journal of Hazardous Materials*. – 2005. – Volume 121. – Issues 1–3. – P. 23–30. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2005.01.031.
8. Трифонов О. В., Брега Д. А., Болоховец А. А., Палазюк Е. С. Влияние выбора моделей горения и механизмов реакций на достоверность прогнозирования перехода горения в детонацию // Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии: сб. науч. тр. Нац. аэрокосм. ун-та им. Н. Е. Жуковского «ХАИ». – Х., 2014. – Вып. 63. – С. 160–169.
9. Manninen, Mikko, Taivassalo and other. On the mixture model for multiphase flow. – Espoo 1996, Technical Research Centre of Finland, VTT Publications, 1996. – 288. – 67 p.
10. ANSYS Inc., ANSYS CFX 18 -Solver Theory Guide, 2017.
11. Налисько Н. Н. Параметры макрокинетики горения углеводородов в численном расчете аварийных взрывов в горных выработках // Надзвичайні ситуації: попередження та ліквідація. – 2017. – № 1 (2017). – С. 75–88.
12. Poinso T., Veynante D. Theoretical and numerical combustion. 2nd ed. – Philadelphia : Edwards, 2005. – 522 p.
13. Frank Lu, Meyers Jason, Wilson Donald. Experimental study of propane-fueled pulsed detonation rocket // 12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies. – 2003. – 6974.

References (transliterated)

1. Zhao W., Deiterding R., Cai X., Liang J., Yang X., Sun M. Flame acceleration and detonation transition in premixed and inhomogeneous supersonic flows. *Journal of Fluid Mechanics*. 2024, 1001:A36. DOI:10.1017/jfm.2024.812.
2. Mikoshiba K., Sardeshmukh S. V., Stephen D. Heister, Impulse generated from detonation waves in non-premixed and partially premixed reactants. *Applications in Energy and Combustion Science*. 2024, V. 18. DOI: 10.1016/j.jaecs.2024.100264.
3. Xiao Liang, Rui-li Wang. Verification and validation of detonation modeling. *Defence Technology*. 2019, Volume 15, Issue 3, pp. 398–408. DOI: 10.1016/j.dt.2018.11.005.
4. Shamsadin Saeid M. H., Ghodrat M. Numerical Simulation of the Influence of Hydrogen Concentration on Detonation Diffraction Mechanism. *Energies*. 2022, 15, 8726. DOI: 10.3390/en15228726.
5. Wandong Zhao, Caizhi Fan, Ralf Deiterding, Xiaokang Li, Jianhan Liang, Xiong Yang. A new rapid deflagration-to-detonation transition in a short smooth tube. *Physics of Fluids*. 2024; 36 (3): 036104. DOI: 10.1063/5.0191500.
6. Romick Christopher M., Aslam Tariq D. High-order shock-fitted detonation propagation in high explosives. United States: N. p., 2016. Web. DOI: 10.1016/j.jcp.2016.11.049.
7. Fotis Rigas, Spyros Sklavounos. Experimentally validated 3-D simulation of shock waves generated by dense explosives in confined complex geometries. *Journal of Hazardous Materials*. 2005, Volume 121, Issues 1–3, pp. 23–30. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2005.01.031.
8. Трифонов О. В., Брега Д. А., Болоховец А. А., Палазюк Е. С. Влияние выбора моделей горения и механизмов реакций на достоверность прогнозирования перехода горения в детонацию [The influence of the combustion models and reaction mechanisms choice on the reliability of predicting the transition of combustion to detonation]. *Otkrytye informatsionnye i komp'yuternye integrirovannye tekhnologii: sb. Nauch. Tr. Nats. Ayero-kosm. Un-ta im. N.E. Zhukovskogo "KhAI"* [Open Information and Computer Integrated Technologies: coll. of scientific papers. National Aerospace University. "Kharkiv Aviation Institute"]. Kharkov, 2014, vol. 63, pp. 160–169.
9. Manninen, Mikko, Taivassalo and other. On the mixture model for multiphase flow. Espoo 1996, Technical Research Centre of Finland, VTT Publications, 1996. 288. 67 p.
10. ANSYS Inc., ANSYS CFX 18 -Solver Theory Guide, 2017.
11. Налисько Н. Н. Параметри макрокинетики горения углеводородов в численном расчете аварийных взрывов в горных выработках [Parameters of hydrocarbon combustion macrokinetics in numerical calculation of emergency explosions in mine workings]. *Nadzvychnyi sytuatsiyi: poperedzheniya ta likvidatsiya* [Emergency Situations: Prevention and Liquidation]. 2017, no. 1 (2017), pp. 75–88.
12. Poinso T., Veynante D. Theoretical and numerical combustion. 2nd ed. Philadelphia, Edwards, 2005. 522 p.
13. Frank Lu, Meyers Jason, Wilson Donald. Experimental study of propane-fueled pulsed detonation rocket. *12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies*. 2003. 6974.

Надійшло (received) 03.05.2025

Відомості про авторів / Information about authors

Філонов Владислав Віталійович – PhD, старший науковий співробітник, Відділ гідробіоніки та керування примезовим шаром, Інститут гідромеханіки НАН України; Завідувач відділу моделювання процесів тепло-масообміну та переносу випромінювання, ТОВ «ІПП-ЦЕНТР», м. Київ; тел.: (093) 596-84-65; ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8123-026X>; e-mail: workfvv@gmail.com.

Filonov Vladyslav Vitaliiovich – Doctor of Philosophy (PhD), senior researcher of the Hydrobionics and Boundary Layer Control department, Institute of Hydromechanics National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine; Head of the Department of Heat&Mass and Radiation Transfer Processes Modeling at IPP-Centre LLC, Kyiv; tel.: (093) 596-84-65; ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8123-026X>; e-mail: workfvv@gmail.com.

Воропаєв Геннадій Олександрович – доктор фізико-математичних наук, професор, директор Інституту гідромеханіки НАН України, Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», м. Київ; тел.: +38(044) 371-65-17; ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5615-6344>; e-mail: voropaiev.gena@gmail.com.

Voropaiev Gennadii Oleksandrovych – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Director Institute of Hydromechanics National Academy of Sciences of Ukraine, National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Kyiv; tel.: +38(044) 371-65-17; ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5615-6344>; e-mail: voropaiev.gena@gmail.com.