

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
МНОГОФАЗНЫХ РЕАГИРУЮЩИХ ТЕЧЕНИЙ  
И ГЕТЕРОГЕННОЙ ДЕТОНАЦИИ В ИХФ РАН**

С.М. Фролов

Учреждение РАН Институт химической физики  
им. Н.Н. Семенова. Москва. Россия

E-mail: smfrol@chph.ras.ru

Совершенствование рабочего процесса и конструкции современных двигателей и энергетических установок на жидком топливе, включая поршневые, прямоточные, ракетные и газотурбинные двигатели, а также перспективные детонационные двигатели с импульсной и непрерывной детонацией, требует глубокого понимания внутрикамерных физико-химических процессов: смесеобразования при впрыске жидких струй горючего в камеру сгорания, самовоспламенения или зажигания паров горючего, горения капель и образования вредных веществ (NO, CO, сажа). Для этой цели в ИХФ РАН разработана иерархия математических моделей и вычислительных программ, которые позволяют проводить расчеты самовоспламенения и горения отдельных капель, однородных монодисперсных капельных газозвесей, турбулентных двухфазных струйных течений и волн гетерогенной капельной детонации как в одномерной, так и в многомерной постановке задачи. Важнейшие особенности моделей и программ – возможность использования как глобальных, так и детальных кинетических механизмов окисления и пиролиза горючего с образованием вредных веществ, учет влияния коллективных эффектов при самовоспламенении и горении плотных капельных газозвесей, прямой учет молекулярного смешения и других процессов переноса в турбулентном поле течения и обеспечение «сеточной» независимости результатов.

В данном сообщении будут представлены примеры расчетов рабочего процесса в дизеле, в двигателе с гомотенным зарядом, в двигателе со смешанным газодизельным циклом и т. д., а также примеры расчетов волн гетерогенной капельной детонации в воздушных смесях тяжелых углеводородных горючих. При обсуждении результатов расчетов особое внимание будет уделено физико-химическим эффектам, вызванным учетом детальной кинетики химических превращений, коллективных эффектов в плотных газозвесах капель и фрагментов их дробления, а также конечных скоростей молекулярных и турбулентных процессов переноса.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, программ фундаментальных исследований Президиума РАН и Программы «Комиссии по модернизации и технологическому развитию экономики России» при Президенте РФ.

**MATHEMATICAL MODELLING OF MULTIPHASE  
REACTING FLOWS AND HETEROGENEOUS  
DETONATIONS IN SEMENOV INSTITUTE  
OF CHEMICAL PHYSICS**

S.M. Frolov

Semenov Institute of Chemical Physics, Moscow, Russia

E-mail: smfrol@chph.ras.ru

Improvements in the design and operation process of modern liquid-fueled transportation engines and power plants, including piston engines, ramjets, rocket and gas turbine engines as well as advanced engines with pulsed or continuously rotating detonations, imply deep understanding of all relevant physical and chemical process in combustion chambers, namely, mixture formation at liquid fuel injection, forced ignition or self-ignition of fuel vapors, transient combustion of liquid fuel drops and pollutant (NO, CO, soot, etc.) formation. For this purpose, the hierarchy of physical and mathematical models and computer codes capable of simulating ignition and combustion of single fuel drops, monodispersed and polydispersed drop suspensions, turbulent two-phase sprays and heterogeneous detonation waves in one-dimensional and full three-dimensional formulations has been developed in the Semenov Institute of Chemical Physics. The most important features of the models and computer codes are the possibility of applying both overall and detailed reaction mechanisms of fuel pyrolysis and oxidation with due regard for pollutant formation, the account for spray (screening) effects of neighboring drops in dense drop suspensions on the rates of chemical and physical processes, the account for molecular mixing and other molecular transport processes in the turbulent flow field, and grid independence of computational results.

In the presentation, a number of computational examples will be discussed, including the operation processes in diesel engines, in engines with combined cycle, in homogeneous-charge compression-ignition engines, etc., as well as computational examples for heterogeneous detonations in drop suspensions of heavy hydrocarbon fuels in air. The discussion of the results will be mostly focused on various physical and chemical phenomena arising due to the application of detailed reaction mechanisms of fuel oxidation, due to taking spray effects in dense drop clouds into account, and due to considering finite rates of molecular and turbulent transport processes.

The work was performed with the support from the Russian Foundation for Basic Research, Programs of Basic Research of the Presidium of the Russian Academy of Sciences, and the Program of «Commission on Modernization and Technological Development of Russia's Economy».