УДК 534.222

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ ФРОНТА ДЕТОНАЦИИ МЕТАНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ

Троцюк А.В., Фомин П.А., Васильев А.А.

Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 11-01-00634), Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 26.2 «Горение и взрыв», Ведущей научной школы РФ НШ-247.2012.1. Расчеты выполнены на суперкомпьютере МВС-100К Межведомственного Суперкомпьютерного Центра (МСЦ РАН), Москва.

АННОТАЦИЯ

Работа посвящена численному исследованию многофронтовой (ячеистой) структуры двумерной детонационной волны в стехиометрической метано-воздушной смеси при нормальных условиях. Для этого была разработана модель детонационного горения метана в рамках двухстадийного механизма детонационной кинетики (индукционная стадия и стадия основного тепловыделения). Проведено численное моделирование двумерной структуры детонационных волн в метано-воздушной смеси в широком диапазоне поперечных размеров канала. Изучены изменения в установившейся структуре самоподдерживающейся волны при вариации ширины канала. Исходя из анализа полученных картин течения, размер детонационной ячейки стехиометрической метано-воздушной смеси определен равным 33±3 см. Эта величина находится в прекрасном согласии с экспериментальными данными. Предложенная модель кинетики детонационного горения метано-воздушных и метано-кислородных смесей обладает высокой точностью и согласована со вторым началом термодинамики. Достоинством модели является ее простота и удобство при ее интегрировании в многомерные численные газодинамические коды.

ВВЕДЕНИЕ

Обширные экспериментальные и теоретические исследования детонации в газах [1,2] показали, что реальная структура детонационного фронта сильно отличается от той, что следует из одномерной теории Зельдовича [3]. Ведущий ударный фронт имеет сложную, повторяющуюся во времени ударно-волновую структуру. Основной элемент этой структуры − тройная конфигурация, состоящая из ножки Маха (пересжатая детонационная волна (ДВ)), падающей волны (затухающая ДВ) и примыкающей к ним в тройной точке отражённой (поперечной) волны [1,2]. Эти детонационные структуры в эксперименте рисуют на следовых отпечатках свои траектории в виде ромбовидных ячеек. [1,2,4]. Поперечный размер ячейки a_0 является характерным размером структуры фронта ДВ.

Газовые смеси можно разделить на несколько групп [1,2,4]: а) смеси с очень регулярной детонационно-ячеистой структурой (все ячейки на следовом отпечатке имеют поразительно одинаковые размеры и форму); б) смеси со слабо-нерегулярной структурой (ячейки имеют слегка различные размеры и форму); и в) смеси с сильно-нерегулярной структурой (как форма, так и размеры всех ячеек сильно различаются).

К первой группе, например, относятся водородно-кислородные смеси с большим разбавлением аргоном. К последней группе − углеводородо-воздушные смеси. Особенно сильной степенью нерегулярности обладает метано-воздушная смесь, в которой весьма трудно выделить характерную упорядоченную пространственную структуру, и о размере

© Троцюк А.В., Фомин П.А., Васильев А.А.

детонационной ячейки a_0 можно говорить как о некой величине, усредненной по различным участкам детонационной трубы и по многим опытам.

В нашей работе [5] проведено численное моделирование ячеистой структуры двумерной ДВ в водородо-кислородных смесях, было получено хорошее совпадение численных результатов с экспериментальными данными по размеру а0 в широких диапазонах начального давления и степени разбавления аргоном. При численном изучении структуры ДВ в водородо-кислородных смесях с добавками перекиси водорода впервые была обнаружена двухразмерная (бифуркационная) ячеистая структура детонации [6,7]. Отметим, что в абсолютном большинстве исследований моделируются регулярные ячеистые структуры в модельных газовых смесях, смотри обзор литературы в [6,7]. Для моделирования реальных смесей применяется детальный кинетический механизм газовых реакций. Вследствие громоздкости этой кинетики таких работ относительно немного, и они тоже моделируют ДВ с регулярной или слабо-нерегулярной ячеистой структурой. Что касается исследования нерегулярной структуры, то в расчетах [8,9] для модельной смеси, сильно отличающейся своими термохимическими параметрами от какой-либо реальной газовой смеси, была получена нерегулярная ячеистая структура. Использовалась простейшая химическая кинетика в виде одного уравнения типа Аррениуса, описывающего необратимую реакцию тепловыделения с большой энергией активации.

Цель настоящей работы − разработка приближенной модели кинетики химических реакций для описания детонационного горения газовых смесей на основе метана; численное моделирование нерегулярной многофронтовой (ячеистой) структуры двумерной ДВ в стехиометрической метано-воздушной смеси.

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ И МОДЕЛЬ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Динамика сжимаемой химически реагирующей среды описывалась двумерными уравнениями Эйлера.

Химическое превращение вещества в ДВ описывалось согласно разработанной нами модели горения метана в рамках двухстадийного механизма детонационной кинетики (индукционная стадия и стадия основного тепловыделения), впервые предложенного в [10]. Величина периода индукции рассчитывалась по эмпирической формуле [11], рекомендованной в [12]. Использование кинетики [11] дает наиболее точное согласие со всеми известными экспериментальными данными по размеру детонационной ячейки a_0 в смесях на основе метана при использовании аналитической модели детонационной ячейки [13].

Полагалось, что во время периода индукции молекулы метана полностью разлагаются с образованием молекул CO. Брутто- реакция этого разложения выбрана таким образом, чтобы его тепловой эффект был существенно меньше теплового эффекта, соответствующего точке Чепмена-Жуге. Молярная масса смеси при этом уменьшается незначительно.

Основное тепловыделение происходит после истечения периода индукции. Средняя молярная масса газа рассчитывается по кинетическому уравнению модели [14,15].

Внутренняя энергия и теплоемкости газа до и после истечения периода индукции рассчитывались по модели, представленной в [14,15] и наших работах [16,17]. Данная модель на стадии основного тепловыделения была модифицирована для описания метано-воздушных и метано-кислородных смесей.

Предложенная модель кинетики детонационного горения метана согласована со вторым началом термодинамики, константы модели имеют четкий физический смысл и вычисляются по табличным термохимическим параметрам смеси до проведения численных расчетов. Проведенные расчеты параметров волны Чепмена-Жуге и размеров ячейки ДВ показали высокую точность модели. Достоинством данной модели является ее простота и удобство при использовании в многомерных численных газодинамических кодах.

Система определяющих уравнений замыкалась известным термическим уравнением состояния для идеального газа.

Численное моделирование было проведено для стехиометрической метано-воздушной смеси при нормальных начальных условиях.

На верхней, нижней и левой стенках канала ставились условия непротекания [18], а на правой границе задавалось условие невозмущенного начального состояния газа. Детонационная волна инициировалась вблизи левого закрытого конца канала и распространялась слева направо вдоль оси x. Размер и энергия очага

инициирования [5] выбирались достаточно большими для обеспечения сверхкритического режима инициирования ДВ в метано-воздушной смеси. Задача определения минимальной критической энергии инициирования в данном исследовании не ставилась.

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Полученная система уравнений совместно с дополнительными соотношениями является гиперболической системой уравнений законов сохранения с релаксационными источниковыми членами в правой части, моделирующими термохимические превращения в газовой среде. При численном решении системы использовалась адаптивная подвижная структурированная многозонная сетка.

По оси x строилась подвижная сетка с общим числом ячеек N_x, из них N_{x1} ячеек образовывали равномерную сетку с размером ячейки hx. Равномерная сетка охватывала область течения с большими градиентами параметров в окрестности ведущего ударного фронта ДВ и перемещалась вместе с ним по оси x. Оставшиеся $N_{x2}=N_x-N_{x1}$ ячеек образовывали неравномерную сетку, которая занимала область от начала счетной области x=0 до начала равномерной сетки.

По оси y использовалась равномерная неподвижная сетка с общим числом ячеек N_y и размером счетной ячейки $h_y=H/N_y$, где H поперечный размер канала. Как правило, выбиралось $h_y=h_x$, и в данных исследованиях характерные числа ячеек составляли $N_x=2000$, $N_{x1}=1875$, $N_y=4000$.

Такой подход позволил уменьшить общее число счетных ячеек и снизить требования к объему оперативной памяти компьютера с одновременным сохранением высокого пространственного разрешения в необходимых областях течения.

Численное решение системы уравнений на описанной выше двумерной сетке находилось с использованием конечно-объемных MUSCL TVD схем, являющихся глубоким развитием классической схемы типа Годунова [18]. Расчет исходных величин для решения задачи Римана на гранях контрольного объема по оси *x* в зоне с равномерной сеткой осуществлялся схемой 4-ого порядка точности [19, 20], а в зоне с неравномерной сеткой – модифицированной для таких сеток согласно [21] схемой 3-ого порядка [22]. По оси y величины вычислялись с использованием схемы 4-ого порядка точности [19, 20].

В настоящей работе использовался алгоритм (solver) приближенного решения задачи Римана - solver HLLC [23]. Данный алгоритм является быстрым (безитерационным) высокоточным инструментом для определения потоков через грани контрольного объема в схемах типа MUSCL. При реализации данного алгоритма для решения задачи Римана в случае химически реагирующего газа был использован "Метод релаксации энергии", предложенный в [24]. Интегрирование по времени осуществлялось со вторым порядком точности путем использования аддитивных явно-неявных методов Рунге-Кутта [25]. При этом жесткие источниковые кинетические члены трактовались неявным образом, а гидродинамические потоки – явным. Шаг по времени определялся на каждом временном слое исходя из условия устойчивости [18], в данных вычислениях типичные значения числа Куранта составляло CFL=0,3.

Была проведена параллелизация разработанного численного кода для моделирования детонационных течений на многопроцессорных вычислительных системах. Использовалась техника «domain decomposition», согласна которой вся вычислительная область разбивалась на подобласти по числу используемых со-процессоров. Обмен необходимыми данными между со-процессорами осуществлялся с помощью команд библиотеки MPI. В данном исследовании основные расчеты были проведены на 256 со-процессорах.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Результаты моделирования стехиометрической метано-воздушной смеси показаны на рис.1–4, где приведена численная шлирен-визуализация поля течения. Градиент плотности четко прорисовывает не только форму ведущего ударного фронта ДВ и структуру поперечных волн, но и контактные разрывы. Значительные изменения плотности в момент истечения периода индукции, связанные с началом стадии основного тепловыделения, отчетливо показы-

вают двумерную структуру зоны индукции ДВ. Координаты по осям *x* и *y* на всех рисунках приведены в сантиметрах.

Размер детонационной ячейки для метано-воздушной смеси определялся по процедуре, аналогичной использованной при численном исследовании регулярных и двухразмерных ячеистых структур [5,6,7]. Первоначальная высота канала H выбиралась достаточно произвольно, обычно она задавалась незначительно превышающей предполагаемый размер ячейки a_0. Однако в данном исследовании мы начинали моделирование с H=15 см, что, как выяснилось в дальнейшем, было значительно меньше размера ячейки. Дальнейшее варьирование в расчетах H влияло на число поперечных волн, остающихся на фронте ДВ после ее инициирования и выхода на самоподдерживающийся режим Чепмена-Жуге, тем самым определялся размер ячейки.

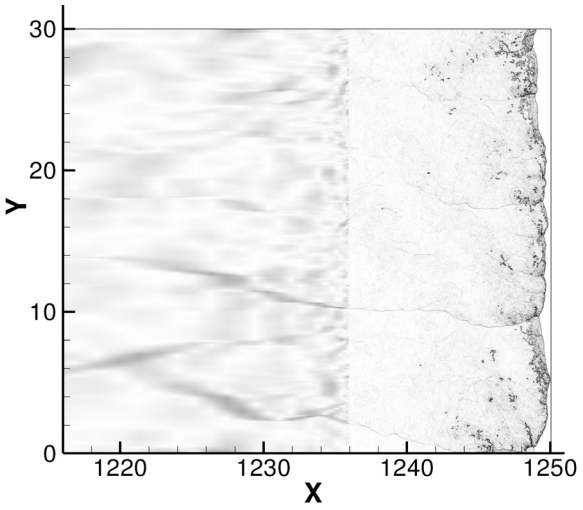

Рис.1 Численная шлирен-визуализация структуры ДВ в канале H=30 см при x_{fr}=1250 см.

На рис.1 изображена структура ДВ в канале с высотой H=30 см при положении фронта волны x_{fr}=1250 см. Анализ изменения средней скорости ДВ по мере ее распространения от места инициирования показал, что к этому моменту волна вышла уже на стационарный режим Чепмена-Жуге. На рисунке мы видим систему из двух основных поперечных волн, которые расположены примерно в положениях y≈0 см и y≈10 см. В данный момент времени поперечные волны двигаются в одном направлении, а не противофазно, как в смесях с регулярной структурой (сравните с рисунками из наших работ [5,27]). Кроме того фронт ДВ имеет также еще целую систему вторичных (более мелких) поперечных волн, различных по своему размеру и направлению движения. На рис.2 представлен увеличенный фрагмент фронта ДВ в районе y≈16 см, более подробно показывающий указанные вторичные поперечные волны. Наличие этих мелкомасштабных поперечных волн в рассматриваемой смеси вызывает необходимость поддерживать крайне высокое пространственное разрешение расчетной сетки в зоне индукции за лидирующим ударным фронтом. Расчеты проводились при характерном размере расчетной сетке $h_y=h_x\approx 8\cdot10^{-3}$ см. Высокое пространственное разрешение приводило к малому разрешенному шагу по времени и большому числу расчетных ячеек. Что в свою очередь требовало применение параллелизации численного кода и использование многопроцессорного суперкомпьютера для проведения численного моделирования детонации метановой смеси.

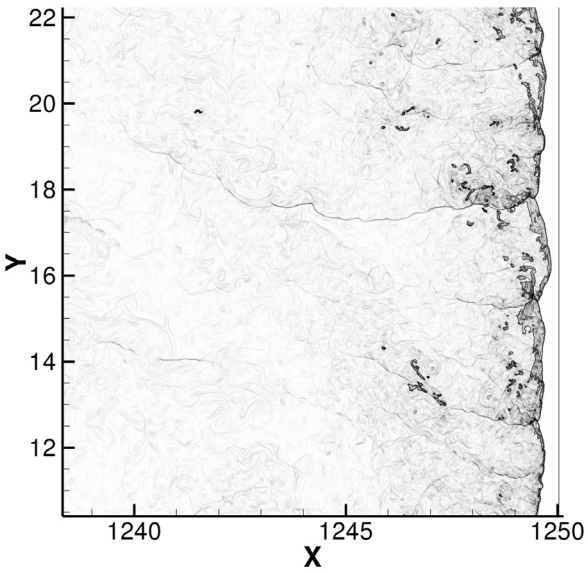

Рис.2 Численная шлирен-визуализация структуры ДВ в канале H=30 см при x_{fr}=1250 см. Увеличенный фрагмент поля течения, см Рис.1.

В целом ударно-волновая структура фронта ДВ носит крайне нерегулярный характер (сравни с рисунками из [5,27]). Кроме того, на рис.2 наблюдается значительное количество несгоревших кусочков газа на довольно значительном расстоянии за лидирующим ударным фронтом ДВ. Такое явление не было замечено при моделировании регулярных смесей на основе водорода [5,27].

Проведение расчетов до расстояний больше десяти метров, пройденных ДВ, было вызвано тем, что метановые смеси обладают экстремально большой критической энергией инициирования [12, 26]. Поэтому в расчетах мы вынуждены были использовать инициатор большой энергии, что приводило к нестационарности детонационного процесса на больших дистанциях. Для примера на рис.3 приведена структура ДВ в том же канале при положении фронта x_{fr}=920 см. В отличие от картины на рис.1, здесь мы видим одну основную поперечную волну в положении y≈15 см. Вторичная система поперечных волн и наличие областей несгоревшего газа аналогичны течению на рис.1. Усредненная по двумерным пульсациям скорость ДВ в этот момент слабо отличается от скорости ДВ, соответствующей рис.1, и обе они очень близки (с точностью до нескольких процентов) к скорости Чепмена-Жуге D_{CJ}=1809 м/с, полученной из термодинамических расчетов. Различия в ударно-волновой структуре фронта ДВ могут быть связаны с тем, что градиенты параметров за фронтом ДВ к этому моменту еще не вышли на свои автомодельные значения. Этот вопрос требует дальнейшего исследования.

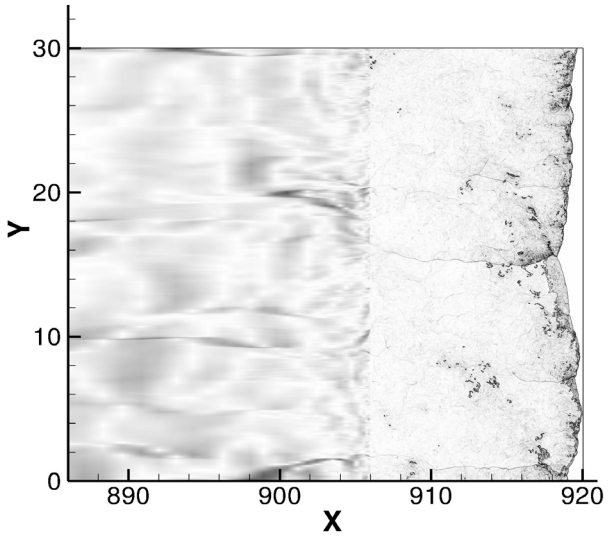

Рис.3 Численная шлирен-визуализация структуры ДВ в канале H=30 см при x_{fr}=920 см.

На рис.4 приведена структура течения в канале с высотой H=35 см при положении фронта волны x_{fr}=1500 см. Принципиально ударно-волновая картина течения не отличается от картины течения на рис.1. Также имеются две основные поперечные волны, расположенные в данный момент времени при y≈10 см и y≈30 см, синфазно двигающиеся вдоль лидирующего ударного фронта ДВ к верхней стенке канала. Размер и интенсивность основных поперечных волн не отличается от аналогичных волн рис.1. Мелкомасштабные вторичные поперечные волны и области несгоревшего газа также аналогичны.

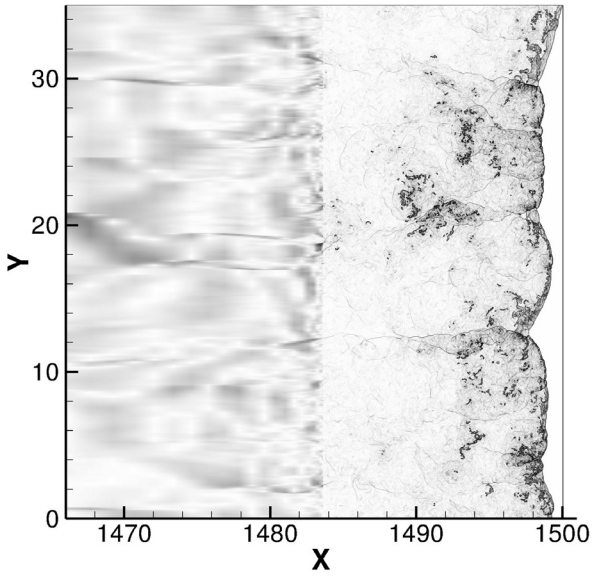

Рис.4 Численная шлирен-визуализация структуры ДВ в канале H=35 см при x_{fr}=1500 см.

Дальнейшие расчеты с изменением величины H показали, что ячеистая структура ДВ испытывает значительные изменения по сравнению со структурами для размеров канала, представленных на рис.1 и 4. Так, при H=25 см формируется детонационное течение с одной поперечной волной на фронте ДВ. Зона индукции за лидирующим ударным фронтом имеет крайне нерегулярную форму, имеется значительное количество крупных областей несгоревшей смеси. При H=40 см мы имеем, по крайней мере, 4 основных поперечных волны, в остальном структура фронта аналогична приведенной на рис.1 и 4.

Исходя из анализа полученных численных результатов, поперечный размер детонационной ячейки для стехиометрической метано-воздушной смеси определен равным a_0.=33±3 см. Данная величина находится в прекрасном согласии с экспериментально оцениваемой величиной ячейки для данной смеси, см. [4,12,26].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана приближенная модель кинетики детонационного горения метана. Простота и высокая точность модели позволяют использовать ее в многомерных численных расчетах детонационных течений метано-кислородных и метано-воздушных смесей.

Проведенное двумерное численное моделирование структуры фронта детонации стехиометрической метано-воздушной смеси показало прекрасное совпадение поперечного размера ячейки с известными экспериментальными данными. Впервые для реальной топливо-воздушной смеси в расчетах была воспроизведена нерегулярная ячеистая структура со всеми основными ее особенностями: хаотическое несогласованное движение основных поперечных волн; наличие вторичных поперечных волн на ведущем ударном фронте, меньших по размеру, но не менее интенсивных. Именно вторичные волны ответственны за мелкоячеистую сетку внутри основной ячейки, фиксируемую на следовых отпечатках в эксперименте.

В качестве направления последующих исследований предлагается дальнейшее совершенствование предложенной модели детонационной кинетики метана для описания богатых горючим смесей вплоть до формирования сажи в продуктах детонации; численное моделирование структуры ДВ в чистой стехиометрической метано-кислородной смеси и с различными степенями разбавления азотом и другими инертными газами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Войцеховский Б.В., Митрофанов В.В., Топчиян М.Е. Структура фронта детонации в газах. − Новосибирск: Изд-во СО АН СССР, 1963.
2. Fickett W., Davis W.C. Detonation. − University of California Press, Berkeley, CA, 1979.
3. Зельдович Я.Б., Компанеец А.С. Теория детонации. − М.: Гостехиздат, 1955.
4. Нетлетон М. Детонация в газах. − М.: Мир, 1989. – 280 С
5. Троцюк А.В. Численное моделирование структуры двумерной газовой детонации смеси H2-O2-Ar // Физика горения и взрыва. − 1999. − Т. 35, − No.5. − С. 93–103.
6. Fomin, P.A., Trotsyuk, A.V., Vasil'ev, A.A., Mitropetros, K., Hieronymus, H. and Roekaerts, D. Model of chemical reaction kinetics for calculating detonation processes in gas and heterogeneous mixtures containing hydrogen peroxide. // Combustion Science and Technology. − 2006. − Vol. 178, − P. 895-919.
7. Васильев А.А., Васильев В.А., Троцюк А.В. Бифуркационные структуры газовой детонации // Физика горения и взрыва. − 2010. − Т. 46, − No.2. − С. 196−206.
8. Gamezo V.N.; Desbordes D.; Oran E.S. Formation and evolution of two-dimensional cellular detonations. // Combustion and Flame. − 1999. − Vol. 116. − No. 1. −P. 154 − 165.
9. Gamezo V.N., Vasil'ev A.A., Khokhlov A.M., Oran E.S. Fine cellular structures produced by marginal detonations. // Proceedings of the Combustion Institute. − 2000. − Vol. 28. − P. 611 − 617.
10. Левин В. А., Коробейников В. П. Сильный взрыв в горючей смеси газов // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. – 1969. – No.6. – С. 48 – 51.
11. Солоухин Р.И. Методы измерений и основные результаты в экспериментах на ударных трубах. // 7-й Международный симпозиум по ударным трубам. – 1969. − Новосибирск: Изд-во СО АН СССР.
12. Васильев А.А. О влиянии азота на параметры многофронтовой детонации // Физика горения и взрыва. – 1998. – Т. 34, – No.1. – С. 79 – 83.
13. Васильев А.А., Николаев Ю.А. Модель ячейки многофронтовой газовой детонации. // Физика горения и взрыва. – 1976. – Т. 12, – No.5. – С. 744 – 754.
14. Николаев Ю. А. Модель кинетики химических реакций при высоких температурах // Физика горения и взрыва. – 1978. – Т. 14, – No.4. – С. 73 – 76.
15. Николаев Ю. А., Зак Д. В. Согласование моделей химических реакций со вторым началом термодинамики // Физика горения и взрыва. – 1988. – Т. 24, – No.4. – С. 87 – 90.
16. Николаев Ю.А., Фомин П.А. О расчете равновесных течений химически реагирующих газов // Физика горения и взрыва. – 1982. – Т. 18. – No.1. – С. 66–72.
17. Фомин П. А., Троцюк А. В. Приближённый расчёт изоэнтропы химически рав-

новесного газа // Физика горения и взрыва. – 1995. – Т. 31, – No.4. – С. 59 – 62.
18. Численное решение многомерных задач газовой динамики. Под ред. С.К. Годунова. – М.: Наука, 1976.
19. Yamamoto S., Daiguji H. Higher-order-accurate upwind schemes for solving the compressible Euler and Navier-Stokes equations // Computer Fluids. – 1993. – Vol. 22. – No.2/3. – P. 259–270.
20. Daiguji H., Yuan X., Yamamoto S. Stabilization of higher-order high resolution schemes for the compressible Navier-Stokes equation // International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow. – 1997. – Vol. 7. – No.2/3. – P. 250–274.
21. Lin S.-Y., Chin Y.-S. Comparison of higher resolution Euler schemes for aeroacoustic computations // AIAA Journal. – 1995. – Vol. 33. – No.2. – P. 237–245.
22. Chakravarthy S.R., Osher S. A new class of high accuracy TVD schemes for hyperbolic conservation laws // AIAA 23rd Aerospace Sciences Meeting. Reno, Nevada. – 1985. – AIAA Paper No.85–0363.
23. Batten P., Leschziner M.A., Goldberg U.C. Average-state Jacobians and implicit methods for compressible viscous and turbulent flows // J. Comput. Phys. – 1997. – Vol. 137. – P. 38–78.
24. Coquel F. and Perthame B. Relaxation of energy and approximate Riemann solvers for general pressure laws in fluid dynamics // SIAM J. Numer. Anal. – 1998. – Vol. 35. – No.6. – P. 2223–2249.
25. Shen J.W., Zhong X. Semi-implicit Runge-Kutta schemes for non-autonomous differential equations in reactive flow computations. – 1996. – AIAA Paper No.96–1969.
26. Vasil'ev A.A., Valishev A.I., Vasil'ev V.A., Panfilova L.V., Topchian M.E. Detonation hazards of methane mixtures. // Archivum Combustionis. – 2000. – Vol. 20. – No. 3-4. – P.31 – 48.
27. Васильев А.А., Троцюк А.В. Экспериментальное исследование и численное моделирование расширяющейся многофронтовой детонационной волны // Физика горения и взрыва. – 2003. Т. 39, − No.1. − С. 92 − 103.

© Троцюк А.В., Фомин П.А., Васильев А.А.