УДК 534.222 + 536.46

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЯЧЕИСТОЙ СТРУКТУРЫ ДЕТОНАЦИИ МЕТАНО-КИСЛОРОДНОЙ СМЕСИ

Троцюк А.В., Васильев А.А.

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

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 14-03-00838 и № 14-01-00406), Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 26.2 «Горение и взрыв». Расчеты выполнены на суперкомпьютере МВС-100К Межведомственного Суперкомпьютерного Центра (МСЦ РАН), Москва

АННОТАЦИЯ

Проведено двумерное численное исследование многофронтовой (ячеистой) структуры двумерной детонационной волны в стехиометрической метано-кислородной смеси при нормальных условиях. Разработана модель детонационного горения метана в рамках двухстадийного механизма детонационной кинетики (индукционная стадия и стадия основного тепловыделения). Предложенная модель кинетики обладает высокой точностью и согласована со вторым началом термодинамики. Достоинством модели является ее простота и удобство при ее интегрировании в многомерные численные газодинамические коды. Численно изучены изменения в установившейся двумерной структуре самоподдерживающейся детонационной волны при вариации ширины канала в широком диапазоне значений. Исходя из анализа полученных картин течения, размер детонационной ячейки стехиометрической метано- кислородной смеси определен равным 0,3÷0,35 см. Эта величина находится в хорошем согласии с экспериментальными данными.

ВВЕДЕНИЕ

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. Течение за плоским фронтом детонационной волны (ДВ) является неустойчивым. Рост начальных возмущений приводит к тому, что ведущий ударный фронт перестаёт быть гладким и приобретает сложную, повторяющуюся во времени структуру. Основной элемент этой структуры − тройная конфигурация, состоящая из ножки Маха (пересжатая ДВ), падающей волны (затухающая ДВ) и примыкающей к ним в тройной точке отражённой (поперечной) волны [1,2]. Траектории тройных точек представляют собой два пересекающихся семейства линий, которые образуют сетку из ромбовидных ячеек. Эти ячеистые структуры фиксируются в эксперименте на следовых отпечатках [1,2]. Поперечный размер ячейки a_0 является характерным размером неоднородности фронта ДВ. Периодические столкновения поперечных волн, движущихся по фронту ДВ во встречных направлениях, приводят к воспроизводству всей структуры фронта во времени.

Реагирующие газовые смеси по степени правильности ячеистой структуры можно разделить на несколько групп [1,2]: 1) с очень регулярной детонационно-ячеистой структурой (все ячейки на следовом отпечатке имеют одинаковые размеры и форму); 2) слабо-нерегулярная структура (ячейки имеют слегка различные размеры и форму); 3) слаборегулярная структура (как форма, так и размеры всех ячеек сильно различаются); 4) нерегулярная структура (с трудом можно выделить определящую форму ячеек, размер определяется формально по числу поперечных волн на фронте).

© Троцюк А.В., Васильев А.А.

К первой группе, например, относятся водородно-кислородные смеси с большим разбавлением аргоном. К последней группе − углеводородо-воздушные смеси. Особенно сильной степенью нерегулярности обладают смеси на основе метана.

В нашей работе [3] была предложена аппроксимационная модель детонационного горения метано-воздушной смеси. Было проведено двумерное численное моделирование нерегулярной структуры ДВ в данной смеси, определен размер детонационной ячейки [4].

Цель настоящей работы – дальнейшее развитие и верификация 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-кислородной 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 [3] в рамках двухстадийного механизма детонационной кинетики (индукционная стадия и стадия основного тепловыделения), впервые предложенного Левиным и Коробейниковым (1969). Величина периода индукции в метановых смесях рассчитывалась по эмпирической формуле [5], рекомендованной в [6,7]. Как показано в [6,7], использование индукционной кинетики [5] 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 Васильева и Николаева (1976).

Предлагаемая двустадийная модель кинетики является развитием модели [3], и применима для описания химических реакции в детонационных волнах в метановых смесях вида:

$$CH_4 + a_1H_2 + a_2O_2 + a_3N_2 + a_4Ar + a_5H_20,\ a_2>1/2.$$

Сначала рассмотрим период индукции. Заменим реальные многостадийные химические процессы, проходящие во время его развития, некоторой *брутто*-реакцией, которую выберем на основании следующих общих соображений.

Примем во внимание, что рост температуры (и, соответственно, суммарное тепловыделение химических реакций) к моменту окончания периода индукции невелик. Поэтому *брутто*-реакцию выберем таким образом, чтобы ее тепловой эффект Q_t был много меньше максимально возможного теплового эффекта Q_{max}, соответствующего полной рекомбинации продуктов реакции с образованием молекул CO_2 и H_2O.

Учтем, далее, что во время периода индукции происходят химические реакции, связанные с появлением и ростом количества активных центров и развалом молекул метана. В этой связи будем полагать, что в течении периода индукции все молекулы метана разлагаются с образованием молекул CO.

В соответствии с вышесказанным полагаем, что за время периода индукции все молекулы метана рано или поздно испытают химическое превращение вида:

$$CH_4 + O_2 \rightarrow CO + OH + 1.5\ H_2,$$
$$\text{если } a_2 \geq 1, \quad (1)$$
$$CH_4 + a_2O_2 \rightarrow CO + (2a_2-1)OH +$$
$$(2.5-a_2)H_2, \text{ если } 1>a_2\geq 0.5 \quad (2)$$

Если в смеси изначально присутствуют молекулы H_2O, H_2, N_2, Ar, то полагаем, что они во время периода индукции химических превращений не претерпевают.

Нетрудно показать, что для реакции (1) $Q_t<<Q_{max}$, а для реакции (2) $Q_t \leq 0.1Q_{max}$ при $a_3 \geq 0.8$. Таким образом, условие модели о малости тепловыделения во время периода индукции справедливо при $a_3 \geq 0.8$.

Пусть b – доля молекул метана, не претерпевших химическое превращение к некоторому моменту времени t. Величина b монотонно убывает по мере движения смеси по зоне индукции: b=1 при t=0, b=0 в момент окончания периода индукции t_*. Если величина b известна, то в соответствии с вышеизложенным, химический состав газа в течении периода индукции также известен, а его термодинамические параметры могут быть легко рассчитаны как с помощью соответствующих табличных полиномов, так и по приближенным формулам модели [3].

Как правило, скорость химического превращения в конце периода индукции ускоряется. В этой связи представляется разумным выбрать такую формулу для вычисления b, чтобы она

удовлетворяла указанным граничным условиям, а скорость ее уменьшения росла по мере движения смеси в зоне индукции. Например, можно воспользоваться формулой:

$\beta = 1 - Y^n$, $n \geq 1$.

Здесь Y – доля периода индукции:

$$Y(t) = \int_0^t dt / \tau_i ,$$

t_i – период индукции при постоянных параметрах газа. При $t=0$ $Y=0$; при $t=t_*$ $Y=1$. Величину t_i будем рассчитывать по экспериментальной алгебраической формуле [5].

В зоне основного тепловыделения молярную массу газа m вычисляем путем интегрирования дифференциального уравнения:

$$\frac{d\mu}{dt} = 4K_+ \frac{\rho^2}{\mu}(1 - \frac{\mu}{\mu_{max}})^2 -$$

$$AT^{3/4}(1 - \exp(-\frac{\theta}{T}))^{3/2} \rho(\frac{\mu}{\mu_{min}} - 1)\exp(-\frac{E}{RT}) ,$$

где r – плотность смеси, T – температура смеси, R – универсальная газовая постоянна, E, q , μ_{min}, μ_{max}, K_+, A – константы модели [3]. Внутренняя энергия и показатель адиабаты смеси вычисляются по алгебраическим формулам [3].

Предложенная модель кинетики детонационного горения метана согласована со вторым началом термодинамики, ее константы имеют четкий физический смысл и вычисляются по табличным термохимическим параметрам смеси до проведения двумерного численного расчета структуры ДВ. Определение параметров волны Чепмена-Жуге и размеров ячейки ДВ показали высокую точность модели. Достоинством данной кинетики 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-кислородной смеси при нормальных начальных условиях в двумерном прямоугольном канале высотой H.

На верхней, нижней и левой стенке канала ставились условия непротекания (условия «жесткой стенки»), а на правой границе задавалось условие невозмущенного начального состояния газа. Детонационная волна инициировалась достаточно сильным источником вблизи левого закрытого конца канала, и распространялась слева направо вдоль оси x.

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 сетка по оси x с локальным сгущением вблизи фронта ДВ и общим числом ячеек N_x. По оси y использовалась равномерная неподвижная сетка с общим числом ячеек N_y.

Численное решение системы уравнений на описанной выше двумерной сетке находилось с использованием конечно-объемных MUSCL TVD схем типа Годунова. 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, а в зоне с неравномерной сеткой – модифицированной для таких сеток согласно схемой 3-ого порядка. По оси y величины вычислялись с использованием схемы 4-ого порядка точности. В настоящей работе использовался новый современный алгоритм (solver) приближенного решения задачи Римана – solver HLLC (1997). При реализации данного алгоритма для решения задачи Римана в случае химически реагирующего газа был использован «метод релаксации энергии» (1998). Данный метод снимает проблему численного решения распада произвольного разрыва для среды со сложным нелинейным уравнением состояния.

Интегрирование по времени осуществлялось со вторым порядком точности путем использования аддитивных явно-неявных методов Рунге-Кутта. При этом жесткие источниковые кинетические члены трактовались неявным образом, а гидродинамические потоки – явно. Шаг по времени определялся на каждом временном слое исходя из условия устойчивости, в данных вычислениях типичное значение числа Куранта составляло CFL=0,3. Ссылки на литературу по примененным численным алгоритмам можно найти в [4].

Была проведена параллелизация разработанного численного кода с применением техники «domain decomposition». В данном исследовании основные расчеты были проведены на 256 сопроцессорах.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Результаты моделирования стехиометрической метано-кислородной смеси показаны на рис. 1–5, 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 показывают двумерную структуру зоны индукции ДВ. Координаты по осям x и y на всех рисунках приведены в сантиметрах.

Размер детонационной ячейки для метано-кислородной смеси определялся по процедуре, аналогичной использованной при численном исследовании регулярных ячеистых структур, см. [4]. Первоначальная высота канала H выбиралась достаточно произвольно, обычно она задавалась заведомо превышающей предполагаемый размер ячейки a_0. В данном исследовании мы начали моделирование структуры ДВ с H=0,6 см, рис.1. Дальнейшее варьирование в расчетах величины 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.

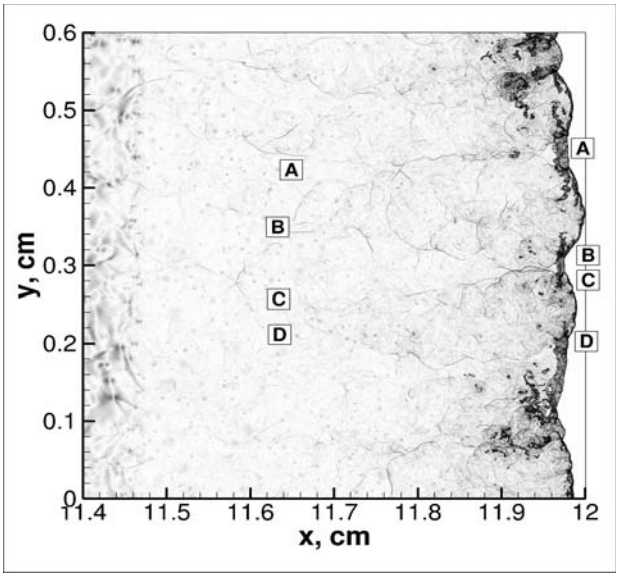

Рис.1 Численная шлирен-визуализация структуры ДВ в канале H=0,6 см при x_{fr}=12 см.

На рис.1 изображена структура ДВ в канале с высотой H=0,6 см при положении фронта волны x_{fr}=12 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 четырех основных поперечных волн (ПВ), обозначенных как AA, BB, CC, DD. Кроме того фронт ДВ имеет также еще целую систему вторичных, третичных, и т.д. более мелких поперечных волн, различных по своему размеру и направлению движения. Эти мелкие поперечные волны обозначены на рисунках как aa, bb, и т.д., a'a' и т.д. Анализ полей плотности, давления, температуры и численного шлирена позволяет однозначным образом определять основные поперечные волны на фронте ДВ. В представленный момент времени волны AA и DD движутся к верхней и нижней стенке канала, соответственно. Волны BB и CC движутся навстречу друг другу, показан момент непосредственно перед их столкновением. Наличие двух пар ПВ на фронте ДВ указывает, что при данной H в канале помещается две детонационные ячейки. Соответственно размер ячейки a_0 может быть оценен как 0,3 см исходя из данного расчета. Анализ изменения средней скорости ДВ по мере ее распространения от места инициирования показал, что к моменту x_{fr}=12 см волна вышла уже на стационарный режим Чепмена-Жуге. Расчет проведен при N_x=4000 , N_y=4000, и h_y=h_x= 1,5·10^{-4} см.

На рис. 2 приведена структура течения в канале с высотой H=0,3 см при том же положении фронта ДВ x_{fr}=12 см. имеются две основные ПВ AA и BB, движущиеся в противоположных направлениях к верхней и нижней стенке канала. Видно что интенсивность и размер основных поперечных волн являются неодинаковыми. Исходя из опыта моделирования регулярных ячеистых структур [5] можно предположить, что в данном варианте размер ячейки a_0 близок к H=0,3 см, но высота канала меньше размера ячейки. Аналогично течению на рис. 1 на фронте ДВ присутствуют многочисленные вторичные поперечные волны. Расчет проведен при N_x=4000 , N_y=2000, и h_y=h_x=1,5·10^{-4} см, т.е. пространственное численное разрешение осталось таким же, как на рис. 1.

Для уточнения размера ячейки a_0 были проведены дополнительные расчеты при варьировании величины H. На рис. 3 показан один из таких расчетов при H=0,35 см. Здесь мы видим пару основных ПВ AA и BB, примерно равных по размеру и по интенсивности. Но при этом ясно видна довольно интенсивная вторичная

ПВ, обозначенная как аа. Такого рода волны отсутствуют в расчете на рис.2. Наличие на фронте зарождающейся новой ПВ свидетельствует о том, что размер канала H незначительно превышает ожидаемый размер ячейки. Расчет проведен при N_x=4000 , N_y=2000.

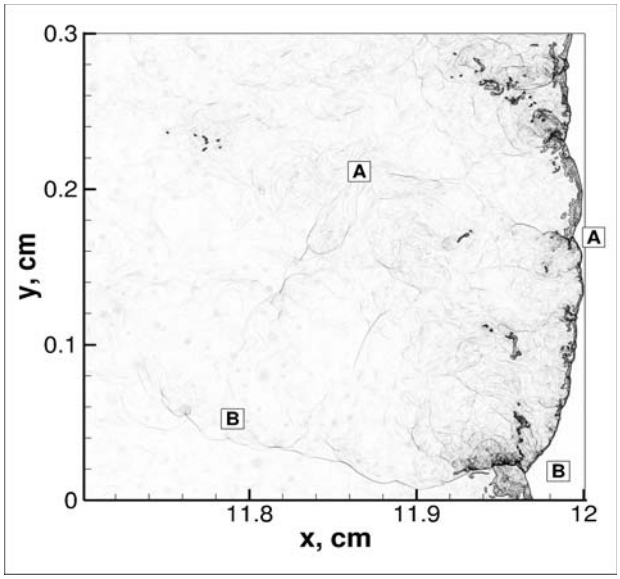

Рис.2 Численная шлирен-визуализация структуры ДВ в канале H=0,3 см при x_{fr}=12 см.

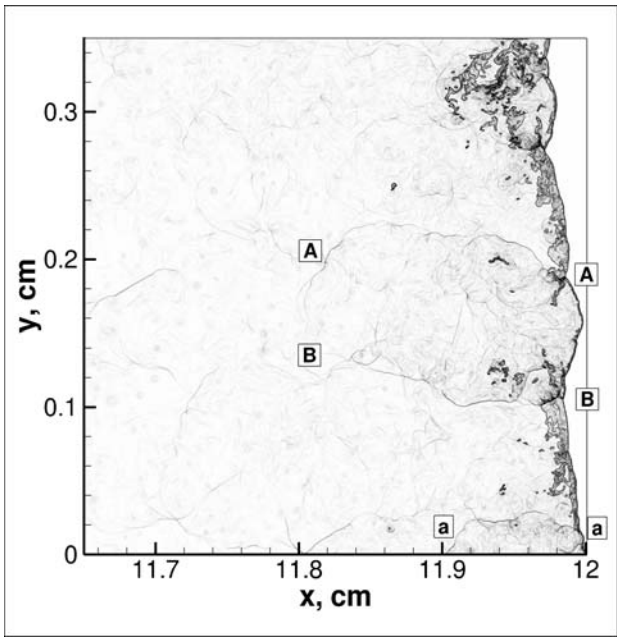

Рис.3 Численная шлирен-визуализация структуры ДВ в канале H=0,35 см при x_{fr}=12 см.

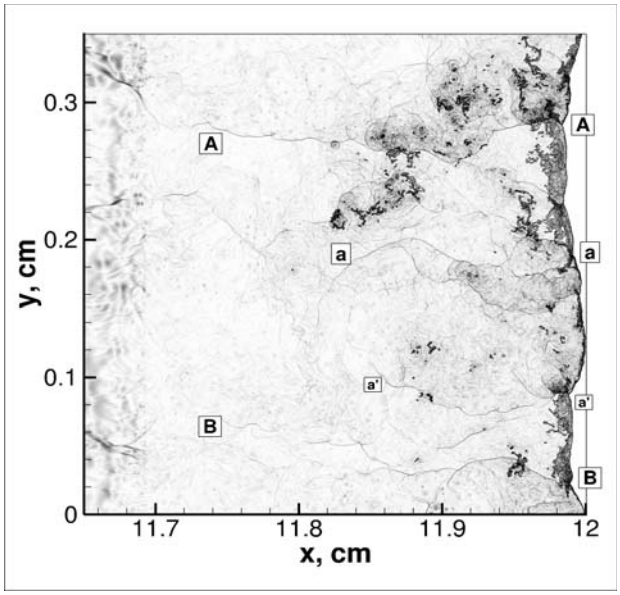

Рис.4 Численная шлирен-визуализация структуры ДВ в канале H=0,35 см при x_{fr}=12 см. Расчет с повышенным разрешением.

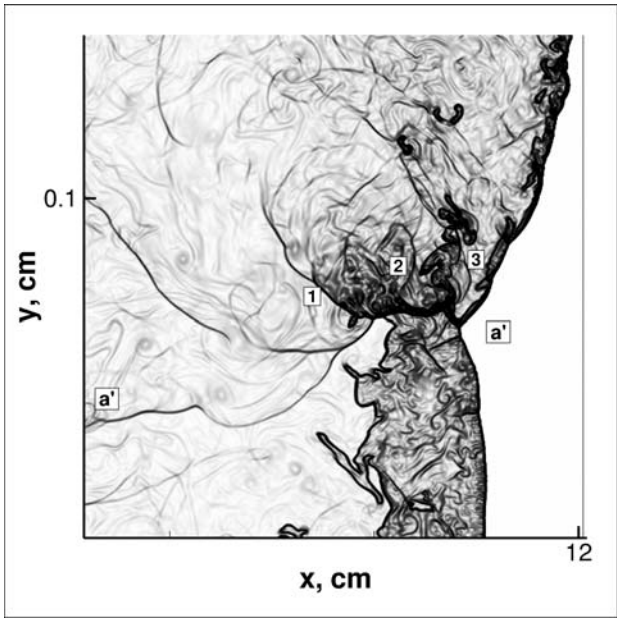

Рис.5 Численная шлирен-визуализация структуры ДВ в канале H=0,35 см при x_{fr}=12 см. Увеличенный фрагмент поля течения рис. 4.

Для исследования влияния размера вычислительной сетки на численные результаты проведен расчет с большим пространствен-

ным разрешением при N_x=4000 , N_y=4000, h_y=h_x= 0,875·10^{-4} см для H=0,35 см. На рис. 4 показаны результаты этого расчета. Как видно из сравнения расчетов на рис. 3 и на рис. 4, на последнем мы видим гораздо более мелкие детали течения на фронте ДВ. Помино наличия вторичной ПВ aa, наблюдаются также многочисленные третичные ПВ, напрмер a'a'. Однако число основных ПВ, формирующих детонационную ячейку, осталось неизменным. Как и в случае рис.3, на фронте имеется пара основных ПВ AA и BB.

На рис. 5 представлен увеличенный фрагмент фронта ДВ для варианта расчета с высоким разрешением, см. рис. 4. Данный рисунок более подробно показывает структуру ведущего ударного фронта ДВ с очень возмущенной и неоднородной зоной индукции за ним, и многочисленными изломами самого фронта в местах присоединения мелкомасштабных поперечных волн. Подобная «тонкая» структура лидирующего ударного фронта была впервые экспериментально обнаружена в работе [8], и успешно воспроизведена в данном исследовании. На рис. 5 также ясно видно, что третичная поперечная волна a'a' сама обладает многофронтовой структурой с поперечными волнами на своем фронте, обозначенными на рис. 5 цифрами 1, 2, 3. Подобная многофоронтовая структура самих поперечных волн была впервые открыта в экспериментах [9]. Рис. 5 показывает, что в данном численном моделировании данная структура фронта ПВ в углеводородной смеси воспроизводится адекватно.

Рис. 1−5 демонстрируют, что в целом ударно-волновая структура фронта ДВ носит крайне нерегулярный характер. Имеются многочисленные, различные по интенсивности и размерам, вторичные поперечные волны. Кроме того, наблюдается значительное количество несгоревших кусочков газа на довольно значительном расстоянии за лидирующим ударным фронтом ДВ. Наличие этого набора уменьшающихся мелкомасштабных поперечных волн и областей несгоревшей смеси вызывает необходимость поддерживать высокое пространственное разрешение расчетной сетки в зоне индукции за лидирующим ударным фронтом. Требование высокого пространственного разрешения приводит к большому числу расчетных ячеек и к малому разрешенному шагу по времени. Это потребовало параллелизации численного кода, и проведения расчетов на многопроцессорном суперкомпьютере.

Исходя из анализа полученных численных результатов, поперечный размер детонационной ячейки для стехиометрической метано-воздушной смеси определен равным a_0.= 0.3−0.35 см. Данная величина находится в прекрасном согласии с экспериментально оцениваемой величиной ячейки для данной смеси, см. [2,6,7].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- Результаты проведенных численных исследований детонации стехиометрической метано-кислородной смеси позволяют сделать следующие основные выводы:
- 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 данной смеси показало прекрасное совпадение поперечного размера ячейки a_0.= 0.3−0.35 см с известными экспериментальными данными.
- Для смеси с реальными теплофизическими и химическими свойствами в расчетах была воспроизведена нерегулярная ячеистая структура со всеми основными ее особенностями: хаотическое несогласованное движение основных поперечных волн; многочисленные вторичные поперечные волны, составляющие иерархию уменьшающихся по размерам возмущений лидирующего ударного фронта ДВ; области несгоревшей смеси на значительном расстоянии за фронтом ДВ.
- Результаты моделирования показали наличие тонкой (ячеистой) структуры на самой поперечной волне. В эксперименте данная тонкая структура проявляется в характерном виде траектории поперечной волны на следовом отпечатке.

ЛИТЕРАТУРА

1. Fickett W., Davis W.C. (1979). Detonation. University of California Press, Berkeley, CA.
2. Nettleton, M.A.(1987). Gaseous Detonations: their nature, effects and control. Chapman and Hall, London, New York (ISBN 0-412-27040-4).
3. Fomin, P.A., Trotsyuk, A.V., Vasil'ev, A.A. (2013). Approximate models of chemical kinetics for detonation processes in mixtures of CH4, H2O2 and O3 with air. 24th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS 2013), July 28–August 2 2013, National Central University, Taipei, Taiwan. In: Proceedings of 24th ICDERS, Paper 0161, 6 p.
4. Trotsyuk, A.V., Fomin, P.A., Vasil'ev, A.A. (2013). Numerical Simulation of Irregular and Double-Cellular Detonation Structures. 24th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS 2013), July 28–August 2 2013, National Central University, Taipei, Taiwan. In: Proceedings of 24th ICDERS, Paper 0141, 6 p.
5. 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.

   Soloukhin, R.I. (1969). Measurement methods and basic results of shock-tube experiments. Proceedings of the 7th Int. Symposium on Shock Tubes, Izd. Sib. Otd. Akad. Nauk SSSR, Novosibirsk.
6. Васильев А.А. О влиянии азота на параметры многофронтовой детонации // Физика горения и взрыва. – 1998. – Т. 34, – No.1. – С. 79 – 83.

   Vasil'ev, A.A. (1998). Effect of nitrogen on multifront detonation parameters. Combustion, Explosion, and Shock Waves, Vol. 34, pp. 72−76.
7. Vasil'ev A.A., Valishev A.I., Vasil'ev V.A., Panfilova L.V., Topchian M.E. (2000). Detonation hazards of methane mixtures. Archivum Combustionis, Vol. 20, No. 3–4, pp. 31–48.
8. Manzhalei, V.I. (1977). Fine structure of the leading front of a gas detonation. Combustion, Explosion, and Shock Waves, Vol. 13, pp. 402–404.
9. Manzhalei, V.I., Mitrofanov, V.V. (1973). The stability of detonation shock waves with a spinning configuration. Combustion, Explosion, and Shock Waves, Vol.9, pp. 614–620.

© Троцюк А.В., Васильев А.А.