УДК 534.222 + 536.46

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ ДЕТОНАЦИИ БОГАТОЙ МЕТАНОВОЗДУШНОЙ 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).
Расчеты выполнены на суперкомпьютере МВС-100К Межведомственного Суперкомпьютерного Центра (МСЦ РАН), Москва

АННОТАЦИЯ

Выполнено двумерное численное исследование многофронтовой (ячеистой) структуры детонационной волны (ДВ) в богатой метановоздушной смеси при нормальных условиях. В расчетах использовалась разработанная нами модель детонационного горения метана в рамках двухстадийного механизма детонационной кинетики (индукционная стадия и стадия основного тепловыделения). Предложенная модель кинетики обладает высокой точностью, согласована со вторым началом термодинамики, удовлетворяет принципу Ле Шателье. Достоинством модели является ее относительная простота и удобство при ее интегрировании в многомерные численные газодинамические коды. Численно изучены изменения в двумерной многофронтовой структуре самоподдерживающейся ДВ при вариации ширины канала в широком диапазоне значений. Исходя из анализа многофронтовой структуры ДВ, размер детонационной ячейки богатой (коэффициент избытка топлива φ=1,5) метановоздушной смеси определен равным a_0=45÷50 см. Эта величина находится в хорошем согласии с данными аналитической модели ячейки, a_0=38 см. Необходимы специальные эксперименты с выбранной смесью для получения новых эмпирических данных о многофронтовой структуре ДВ.

ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальные и теоретические исследования детонации в газах показали (см., например, монографию [1]), 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]. 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]. Поперечный размер ячейки a_0 является характерным размером неоднородности фронта ДВ. Периодические столкновения поперечных волн, движущихся по лидирующему 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]: 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 определяющую форму ячеек, размер определяется формально по числу поперечных волн на фронте).

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 [2] была предложена аппроксимационная двухстадийная модель детонационного горения смесей на основе метана. Было проведено двумер-

ное численное моделирование нерегулярной структуры ДВ в стехиометрической метановоздушной смеси, определен размер детонационной ячейки [3].

Цель настоящей работы – дальнейшее развитие и верификация приближенной модели кинетики химических реакций для описания детонационного горения газовых смесей на основе метана на примере переобогащенной топливом метановоздушной смеси; численное моделирование нерегулярной двумерной многофронтовой (ячеистой) структуры ДВ, и определение размера детонационной ячейки a0 в данной смеси. Заметим, что к настоящему времени многочисленные многомерные численные исследования структуры ДВ проводились только для стехиометрического состава смесей на основе водорода или различных углеводородов. Данное численное моделирование, по-видимому, является пионерским.

В 1976 году была предложена аналитическая модель детонационной ячейки [4]. По своим основным положениям данная модель создавалась для описания регулярных и слабо-нерегулярных ячеистых структур. Однако оказалось, что данная модель достаточно успешно предсказывает размер ячейки и для смесей с нерегулярной структурой [5,6]. В рамках этой, и других аналитических моделей структуры фронта ДВ, размер ячейки определялся для широкого диапазона состава смеси [5,6]. Поэтому интересно сравнить результаты двумерного численного моделирования и аналитического подхода для нестехиометрического состава 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 [2] 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 [7], рекомендованной в [5,6]:

$$\tau_{ind}=6\cdot10^{-15}\cdot[O_2]^{-1}_{eff}\times$$
$$\times exp(33200 \text{ кал/моль}/Rg\cdot T) \text{ с·моль/см}^3,$$

где·$[O_2]_{eff}$ – концетрация кислорода в исходной смеси, моль/см^3

Как показано в [5,6], использование индукционной кинетики [7] 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 [4].

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

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

Основные предположения детонационной двухстадийной модели и расчетные формулы подробно описаны в работе [2]. Главное идеей модели является замена реальных многостадийных химических реакций двумя *брутто*-реакциями: одной для периода индукции, и другой для этапа тепловыделения. Во время периода индукции происходят химические реакции, связанные с появлением и ростом количества активных центров и развалом молекул метана. К концу периода индукции все молекулы CH_4 распадаются. Скорость распада молекул метана однозначно определяется долей истечения периода индукции Y [3], Y=0 в начале зоны индукции; Y =1 в конце зоны индукции.

Этап тепловыделения описывается в терминах средней молярной массы смеси после разложения всех молекул метана. Для описания изменения средней молярной массы выведено дифференциальное кинетическое уравнение. Внутренняя энергия и показатель адиабаты смеси вычисляются по алгебраическим формулам, см. [2].

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

Предложенная модель кинетики детонационного горения метана согласована со вторым началом термодинамики, все константы модели имеют четкий физический смысл и вычисляются по табличным термохимическим параметрам смеси до проведения двумерного численного расчета структуры ДВ. Определение параметров волны Чепмена-Жуге (точка Чепмена-Жуге, пик Неймана) и размера ячейки ДВ показали высокую точность модели для стехиометрических метановоздушной [3] и метанокислородной [8] смесей. Достоинством данной кинетики является ее простота и удобство при использовании в многомерных численных газодинамических кодах.

Численное моделирование было проведено для переобогащенной (коэффициент избытка топлива φ=1,5) метановоздушной смеси при нормальных начальных условиях в двумерном прямоугольном канале высотой H. Высота H в расчетах варьировалась. Значение φ=1,5 соответствует мольной доле метана в смеси c=0,136, что находится на верхнем (богатом) пределе для детонации и вблизи верхнего предела для горения данной смеси [6].

На верхней, нижней и левой стенке канала ставились условия непротекания (условия «жесткой стенки»), а на правой границе задавалось условие невозмущенного начального состояния газа. Детонацион-

ная волна возбуждалась достаточно сильным источником для получения сверхкритического режима инициирования вблизи левого закрытого конца канала, и в дальнейшем 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 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 h_x. 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 основные расчеты проведены при N_x=2000 , N_{x1}=1750 , N_y=2000.

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÷0,4. Ссылки на литературу по примененным численным алгоритмам подробно представлены в [3].

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

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Результаты моделирования богатой метановоздушной 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 показывают двумерную структуру зоны индукции ДВ. Координаты по осям x и y на всех рисунках приведены в сантиметрах.

Размер детонационной ячейки для данной смеси определялся по процедуре, аналогичной использованной при численном исследовании структуры стехиометрической метановоздушной смеси и регулярных ячеистых структур, см. [3]. Первоначальная высота канала H выбиралась достаточно произвольно, обычно она задавалась заведомо превышающей предполагаемый размер ячейки a_0. В данном исследовании мы провели моделирование структуры ДВ в каналах с высотой H=40 см, 45 см, 50 см, 60 см, 65 см, 70 см. Варьирование в расчетах величины H влияло на число поперечных волн, остающихся на фронте ДВ после ее инициирования и выхода на стационарный самоподдерживающийся режим Чепмена-Жуге (C.-J.). По числу поперечных волн и значению H определялся размер ячейки. Все расчеты проведены на значительной дистанции прохождения ДВ по каналу вплоть до положения фронта x_{fr}=1500 см. Это гарантировало выход и распространение ДВ в режиме C.-J. как минимум на последних 500 см канала, что контролировалось по усредненной по пульсациям скорости ДВ и неизменном числе основных поперечных волн (ПВ) на лидирующем фронте ДВ.

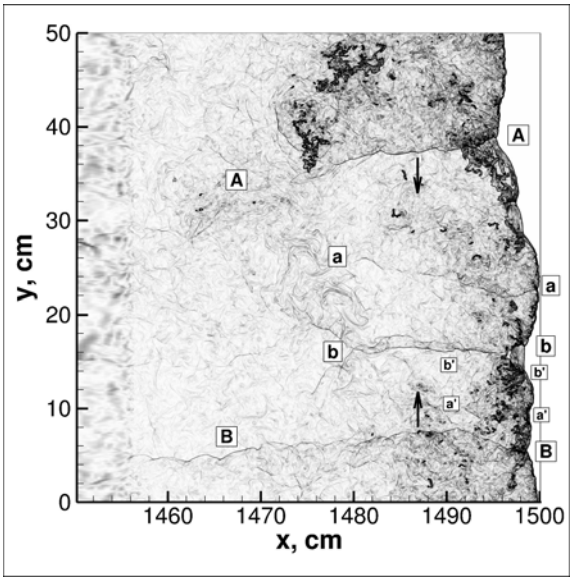

Рис. 1 Численная шлирен-визуализация структуры ДВ в канале H=50 см при x_{fr}=1500 см

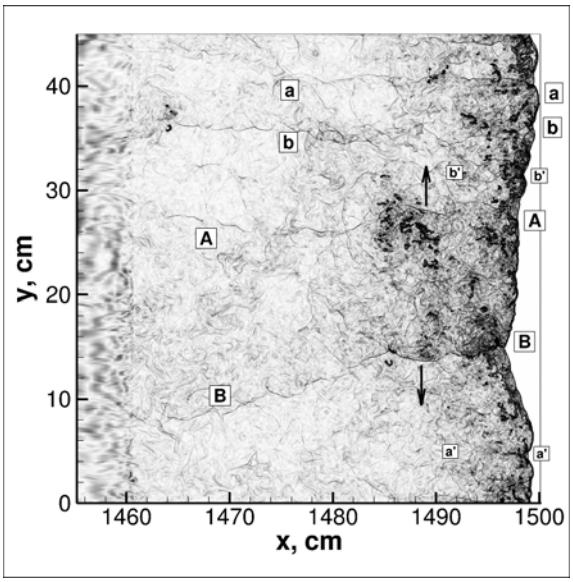

Рис. 2 Численная шлирен-визуализация структуры ДВ в канале H=45 см при x_{fr}=1500 см

На рис. 1 и рис. 2 изображена структура ДВ в каналах с высотой H=50 см и H=45 см. На рисунках мы видим систему из двух основных ПВ, обозначенных как AA и BB. Данные ПВ имеют примерно равную интенсивность и протяженность, положение волн достаточно симметрично относительно осевой линии канала. Направление движения основных ПВ показано на рисунках стрелками. Видно, что кроме этих ПВ, фронт ДВ имеет также еще целую систему вторичных (aa, bb,…), третичных (a'a', b'b',..), и т.д. более мелких поперечных волн, различных по своему размеру и направлению движения. Анализ одновременно цветных полей плотности, давления, температуры и показанного здесь численного шлирена позволяет однозначным образом определять какие волны являются основными ПВ на лидирующем фронте ДВ.

Наличие пары основных ПВ, которые и формируют детонационную ячейку, разнонаправлено двигающиеся и имеющие примерно равные интенсивности и протяженности, свидетельствует о том, что размер канала H на рис. 1 и рис. 2 примерно совпадает с размером ячейки в рассматриваемой смеси. Для нерегулярных смесей размеры детонационной ячейки имеют довольно большой статистический разброс. То есть, возможно существование пары примерно равных ПВ в каналах с разной, но не сильно отличающейся, высотой. Именно такой результат и получен в наших численных расчетах.

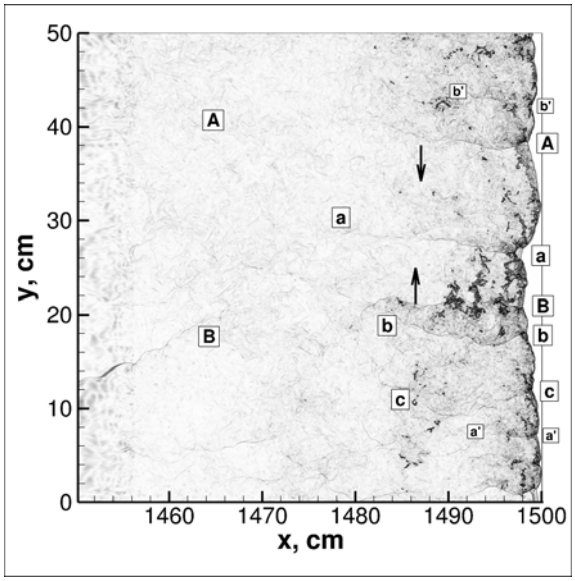

Рис. 3 Численная шлирен-визуализация структуры ДВ в канале H=50 см при x_{fr}=1500 см. Расчет с повышенным разрешением.

Для исследования влияния размера вычислительной сетки на численные результаты проведен расчет с большим пространственным разрешением при N_x=4000, N_{x1}=3500, N_y=4000, для H=50 см. На рис. 3 показаны результаты этого расчета. Как видно из сравнения расчетов на рис. 1 и на рис. 3, на последнем мы видим гораздо более мелкие детали течения на фронте ДВ. Особенно четко это видно на цветных полях плотности и давления. Фиксируются более мелкие куски несгоревшего газа за фронтом ДВ. Помимо наличия вторичных ПВ aa, bb, cc, наблюдаются также многочисленные третичные ПВ, некоторые их них обозначены как a'a', b'b'. Существуют и еще более мелкие ПВ на лидирующем ударном фронте. Са-

мое важное, что число основных ПВ, формирующих детонационную ячейку, осталось неизменным. Как и в случае рис. 1, на фронте имеется пара основных ПВ AA и BB, в представленный момент двигающиеся навстречу друг другу.

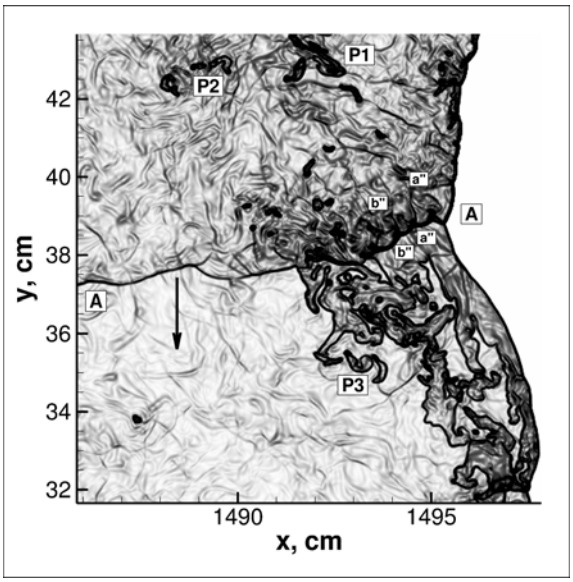

Рис. 4 Численная шлирен-визуализация структуры ДВ в канале H=50 см при x_{fr}=1500 см. Увеличенный фрагмент поля течения рис. 1

На рис. 4 представлен увеличенный фрагмент фронта ДВ для варианта расчета, показанного на рис. 1. 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 [9], и успешно воспроизведена в данном исследовании. На рис. 4 также ясно видно, что основная поперечная волна AA сама обладает многофронтовой структурой с несколькими поперечными волнами на своем фронте, одна пара из них обозначена на рис. 4 как a"a" и b"b". Подобная многофронтовая структура самих поперечных волн была впервые открыта в экспериментах [10]. Рис. 4 показывает, что в данном численном моделировании такая структура фронта ПВ в углеводородной смеси также успешно воспроизводится. На рисунке видны многочисленные области несгоревшего газа, группы которых обозначенные как P1, P2 и P3.

Как уже упоминалось в начале, для уточнения размера ячейки a_0 были проведены дополнительные расчеты при варьировании величины H. При расчетах с H=60 см , 65 см и 70 см точка столкновения пары основных ПВ все более становилась несимметричной относительно оси канала, при этом интенсивность основных ПВ оставалась примерно одинаковой. При этом появлялось пространство для развития и усиления одной из вторичных поперечных типа bb на рис. 2. По мере увеличения H ее интенсивность и протяженность увеличивалась. Это свидетельствует о том, что данные размеры канала превышают размер ячейки. Расчеты с H=40 см показали, что при этом тоже усиливается несимметричность движения пары основных ПВ, однако одна из них начинает ослабевать. Это четко свидетельствует о том, что размер канала меньше чем размер детонационной ячейки. Число вторичных и более мелких ПВ существенно не изменилось, и примерно соответствует рис. 1 и 2. Для H=65 см были проведены расчеты с повышенным пространственным разрешением при N_x=4000, N_{x1}=3500, N_y=4000. Результаты показали, что уменьшения размера расчетных ячеек не повлияло на число поперечных волн характер их поведения, описанные выше.

Рис. 1−4 демонстрируют, что в целом ударно-волновая структура фронта ДВ носит крайне нерегулярный характер. Имеются многочисленные, различные по интенсивности и размерам, вторичные и более мелкие 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 обеспечить высокое пространственное разрешение расчетной сетки в зоне индукции за лидирующим ударным фронтом при расчете метановоздушной смеси.

Исходя из анализа полученных численных результатов, поперечный размер детонационной ячейки для переобогащенной (коэффициент избытка топлива φ=1,5) метановоздушной смеси при нормальных начальных условиях определен как a_0=45÷50 см. Данная величина находится в хорошем согласии с результатом полученным по аналитической модели [4] a_0=38 см. Эмпирические данные по размеру ячейки для данного состава смеси авторам не известны, необходимо проведение специальных крупномасштабных экспериментов с выбранной смесью.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты проведенных численных исследований детонации переобогащенной (коэффициент избытка топлива φ=1,5) метановоздушной смеси при

нормальных условиях позволяют сделать следующие основные выводы:

- Разработанная двухстадийная аппроксимационная модель кинетики детонационного горения метана показала свою применимость для моделирования двумерной структуры и параметров детонационной волны в указанной выше смеси. Расчет параметров волны Чепмена-Жуге (точка Чепмена-Жуге, пик Неймана, скорость волны) показали очень хорошую точность по сравнению с термодинамическими расчетами с использованием детального химического равновесия.
- Проведенное двумерное численное моделирование структуры фронта детонации в данной смеси позволило определить размер детонационной ячейки a0=45÷50 см.
- При адекватном описании теплофизических и химических свойств реальной газовой смеси в расчетах была воспроизведена нерегулярная детонационная 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 фронте основной поперечной волны. Указанные выше особенности нерегулярной ячеистой структуры в исследованной смеси в общих чертах аналогичны результатам, полученным нами для стехиометрических метановоздушных и метанокислородных смесей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Fickett W., Davis W.C. (1979). Detonation. University of California Press, Berkeley, CA.
2. Fomin, P.A., Trotsyuk, A.V., Vasil'ev, A.A. (2014). Approximate model of chemical reaction kinetics for detonation processes in mixture of CH_4 with air. *Combustion Science and Technology*, Vol. 186: 10−11, pp. 1716−1735, DOI: 10.1080/00102202.2014.935643.
3. Fomin, P.A., Trotsyuk, A.V., Vasil'ev, A.A. (2015). Numerical study of cellular detonation structures of methane mixtures. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, Vol. 36, pp. 394–403, DOI: 10.1016/j.jlp.2015.03.012.
4. Васильев А.А., Николаев Ю.А. Модель ячейки многофронтовой газовой детонации // Физика горения и взрыва. – 1976. – Т. 2, – No.5. – С. 744 – 754.

   Vasil'ev, A.A., Nikolaev, Yu.A. (1976). Model of the nucleus of a multifront gas detonation.*Combustion*, *Explosion*, *and Shock Waves,* Vol. 12: 5, pp. 667−674.
5. 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 Wave*, Vol. 34, pp. 72−76.
6. 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.
7. 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.
8. Троцюк А.В., Васильев А.А. Численное исследование ячеистой структуры детонации метанокислородной смеси.// Современная наука – 2014. – No.1 (14). – С. 139 – 145.

   Trotsyuk, A.V., Vasil'ev, A.A. (2014). Numerical study of cellular structure of detonation of a methane-oxygen mixture. *Modern Science*, No.1 (14), pp. 139 – 145.
9. Manzhalei, V.I. (1977). Fine structure of the leading front of a gas detonation. *Combustion*, *Explosion*, *and Shock Waves,* Vol. 13, pp. 402–404.
10. 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.