

УДК 534.222

# МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРЕГУЛЯРНОЙ ЯЧЕИСТОЙ СТРУКТУРЫ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В ДВУХТОПЛИВНОЙ СМЕСИ

А. В. Троцюк, П. А. Фомин

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, pavel\_fomin\_new@mail.ru

Предложена двустадийная приведенная модель химической кинетики детонационного сгорания смеси двух горючих — водорода и оксида углерода (синтез-газ) с окислителем. Это позволило выполнить двумерный численный расчет параметров и нерегулярной ячеистой структуры детонационной волны в рассматриваемой бинарной смеси двух горючих с окислителем.

Ключевые слова: модель кинетики, бинарная смесь, синтез-газ, численный расчет, многофронтная структура, размер ячейки.

DOI 10.15372/FGV20190402

## ВВЕДЕНИЕ

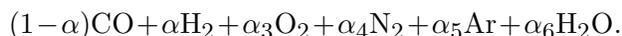
Практика численного моделирования неоднородной многофронтной структуры волны газовой детонации ограничивается, как правило, смесями только одного горючего с окислителем и инертными разбавителями (см., например, расчеты [1, 2]). По-видимому, это объясняется отсутствием соответствующих моделей химической кинетики, не требующих огромных численных вычислений (детальные кинетические схемы окисления углеводородных горючих содержат, как правило, сотни элементарных реакций [3]), но при этом обладающих достаточной точностью описания химических превращений.

Между тем многотопливные газовые смеси широко встречаются в природе и технике. К таковым относится и бинарная смесь водорода с оксидом углерода (синтез-газ), используемая в химической промышленности и теплоэнергетике. Решение проблем взрывобезопасности включает в себя численный расчет параметров и двумерной многофронтной структуры детонационной волны рассматриваемой смеси.

В этой связи в настоящей работе предложена приведенная модель химической кинетики детонационного сгорания синтез-газа. Она использована в численном двумерном расчете структуры и параметров детонационной волны в смеси синтез-газа с кислородом и воздухом.

## ПРИВЕДЕННАЯ МОДЕЛЬ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ ДЕТОНАЦИОННОГО СГОРАНИЯ СИНТЕЗ-ГАЗА

Рассмотрим смесь синтез-газа с инертными разбавителями и водяным паром:



Предлагаемая модель является развитием предложенной ранее модели химической кинетики детонационного сгорания водородокислородных смесей [4]. Модель является двустадийной (период индукции и зона основного тепловыделения). Константы аррениусовских формул для расчета периода индукции в однотопливных смесях  $\text{H}_2$  и  $\text{CO}$  с окислителем считаются известными.

Полагается, что во время периода индукции химических превращений не происходит и, соответственно, молярная масса газа не меняется, а тепловой эффект химической реакции равен нулю.

Как и в [4], для расчета молярной массы газа  $\mu$  после истечения периода индукции используется дифференциальное уравнение

$$\frac{d\mu}{dt} = 4K + \frac{\rho^2}{\mu} \left(1 - \frac{\mu}{\mu_{\max}}\right)^2 - AT^{3/4} \times$$

$$\times \left[1 - \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right)\right]^{3/2} \rho \left(\frac{\mu}{\mu_{\min}} - 1\right) \exp\left(-\frac{E}{RT}\right),$$

а внутренняя энергия  $U$  вычисляется по формуле

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 17-03-01351-а).

$$U(T, \mu) = \left[ \frac{3}{4} \left( \frac{\mu}{\mu_a} + 1 \right) + \frac{3}{2} \left( \frac{\mu}{\mu_a} - 1 \right) \frac{\theta/T}{\exp(\theta/T) - 1} \right] \frac{RT}{\mu} + E \left( \frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{\min}} \right).$$

Здесь  $K_+$  — обобщенная скорость рекомбинации,  $\rho$  — плотность,  $t$  — время,  $T$  — температура,  $\mu_a$ ,  $\mu_{\min}$ ,  $\mu_{\max}$  — молярные массы газа в атомарном, предельно диссоциированном и предельно рекомбинированном состояниях,  $\theta$  — средняя температура колебательных степеней свободы молекул,  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $E$  — средняя энергия диссоциации продуктов реакции.

Константы предлагаемой модели имеют четкий физический смысл. Алгоритм их вычисления подробно описан в [2]. Модель проста (содержит только одно дифференциальное уравнение), согласована со вторым началом термодинамики и удовлетворяет принципу Ле Шателье.

Для того чтобы воспользоваться предложенной здесь кинетической моделью, необходимо решить вопрос, как по известным алгебраическим формулам для расчета периода индукции детонационного сгорания каждого из горючих получить алгебраическую формулу для расчета периода индукции в рассматриваемой двухтопливной смеси. В работе [5] представлены некоторые полуэмпирические подходы для решения этой проблемы, верифицированные путем сравнения рассчитанных по аналитической формуле Васильева — Николаева [6] размеров детонационных ячеек с экспериментом.

Предложим несколько отличный от [5] алгоритм. Рассмотрим приведенную в [5] экспериментальную зависимость размера детонационной ячейки  $a$  в смеси  $(1 - \alpha)\text{CO} + \alpha\text{H}_2 + 0.5\text{O}_2 + 3.76\text{N}_2$  от концентрации водорода. При  $\alpha = 0$  и  $\alpha = 1$  величина  $a$  совпадает с размером ячейки в стехиометрических однотопливных смесях  $\text{CO}$  и  $\text{H}_2$  с воздухом. При росте концентрации водорода от нуля размер детонационной ячейки сначала резко падает, затем падение замедляется. Если  $\alpha$  увеличивается от нуля до 0.1, размер детонационной ячейки уменьшается в пять раз. При  $\alpha = 0.3$  он практически

перестает уменьшаться и становится близким к соответствующей величине для чисто водородной смеси.

Примем согласно [7], что период индукции в однотопливных смесях  $\text{H}_2$  и  $\text{CO}$  вычисляется соответственно по формулам

$$\tau_{\text{H}_2} = \frac{A_{\text{H}_2} \exp(E_{\text{H}_2}/RT)}{[\text{O}_2]},$$

$$\tau_{\text{CO}} = \frac{A_{\text{CO}} \exp(E_{\text{CO}}/RT)}{[\text{O}_2]},$$

где (система СГС)  $A_{\text{H}_2} = 5.38 \cdot 10^{-14}$ ,  $E_{\text{H}_2}/R = 8631$ ,  $A_{\text{CO}} = 1.38 \cdot 10^{-14}$ ,  $E_{\text{CO}}/R = 15098$ . Исходя из подобных зависимостей размера детонационной ячейки от химического состава однотопливных смесей, положим, что формула для расчета периода индукции  $\tau_{\Sigma}$  рассматриваемой стехиометрической смеси синтез-газа с воздухом имеет похожий вид:

$$\tau_{\Sigma} = \frac{A_{\Sigma} \exp(E_{\Sigma}/RT)}{[\text{O}_2]},$$

где константы вычисляются по формулам

$$A_{\Sigma} = A_{\text{CO}} \exp(-k\alpha)(1 - \alpha) + A_{\text{H}_2}(1 - \exp(-k\alpha)(1 - \alpha)),$$

$$E_{\Sigma} = E_{\text{CO}} \exp(-k\alpha)(1 - \alpha) + E_{\text{H}_2}(1 - \exp(-k\alpha)(1 - \alpha)).$$

При таком выборе констант выполняются граничные условия: при  $\alpha = 0$  и  $\alpha = 1$  константы  $A_{\Sigma}$ ,  $E_{\Sigma}$  переходят в соответствующие значения для  $\text{CO}$  и  $\text{H}_2$ . Причем, если константа  $k$  достаточно велика, обеспечивается резкий экспоненциальный переход констант рассматриваемой двухтопливной смеси от значений, соответствующих однотопливной смеси  $\text{CO}$ , к значениям для однотопливной смеси  $\text{H}_2$ . Нетрудно показать, что при таком выборе констант  $A_{\Sigma}$ ,  $E_{\Sigma}$  и  $k = 13$  размер детонационной ячейки, рассчитанный по упомянутой формуле из [6], хорошо соответствует экспериментальной зависимости размера детонационной ячейки от состава двухтопливной стехиометрической смеси синтез-газа с воздухом [7]. Таким образом, приведенная модель кинетики смеси синтез-газа с воздухом замкнута.

## РАСЧЕТ ДВУМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В СМЕСИ СИНТЕЗ-ГАЗА С КИСЛОРОДОМ

Предложенная модель кинетики использована для численных двумерных расчетов детонационной волны (ДВ) в смеси синтез-газа с кислородом. Движение сплошной среды рассчитывалось по алгоритму, аналогичному [2].

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 [1, 2].

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 [8]. Для определения потоков через контрольные границы расчетной ячейки решалась задача о распаде произвольного разрыва (задача Римана) [8]. Вычисление исходных величин для решения задачи Римана по обе стороны грани контрольного объема по оси  $x$  в зоне с равномерной сеткой осуществлялось по интерполяционной схеме 4-го порядка точности [9, 10], а в зоне с неравномерной сеткой — по схеме 3-го порядка [11], модифицированной для таких сеток согласно работе [12]. По оси  $y$  величины на гранях вычислялись по схеме 4-го порядка точности [9, 10].

В настоящей работе применялся новый современный алгоритм (solver) приближенного

решения задачи Римана — solver HLLC [13]. При реализации данного алгоритма задачу Римана в случае химически реагирующего газа решали методом релаксации энергии [14]. 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 — Кутты [15]. При этом жесткие источниковые кинетические члены в правой части уравнений 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  $CFL = 0.3 \div 0.4$ . Библиография по примененным численным алгоритмам подробно представлена в [2].

Параллелизация разработанного численного кода выполнена с применением техники «domain decomposition». В данном исследовании основные расчеты были проведены на 256 процессорных ядрах.

На рис. 1 представлен расчет структуры ДВ в смеси  $0.9\text{CO} + 0.1\text{H}_2 + 0.5\text{O}_2$  при  $p_0 = 1$  атм,  $T_0 = 298.15$  К после выхода детонации на самоподдерживающийся режим с постоянной (в среднем) скоростью распространения. Символами  $AA$ ,  $BB$  и т. д. показаны некоторые из основных поперечных волн (ПВ). Волны  $AA$  и  $BB$  относятся к одному семейству ПВ и движутся сверху вниз, волны  $CC$  и  $DD$  движутся в противоположном направлении и относятся к другому семейству ПВ. Символами  $aa$  и  $bb$  показаны некоторые из многочисленных вторичных ПВ, меньших как по размеру, так и по амплитуде, присутствующих на лидирующем ударном фронте ДВ. В целом рис. 1 дает основное представление о многофронтной структуре ДВ в исследуемой смеси, эта структура достаточно нерегулярна, движение основных ПВ носит довольно несогласованный (хаотичный) характер. Для уточнения превалирующего размера детонационной ячейки была проведена серия численных экспериментов с уменьшающейся высотой канала  $H$ .

На рис. 2 показана многофронтная структура ДВ в канале высотой  $H = 0.3$  см. Имеются две основные ПВ  $AA$  и  $BB$ , движущиеся в фазе (по направлению к верхней стенке канала).

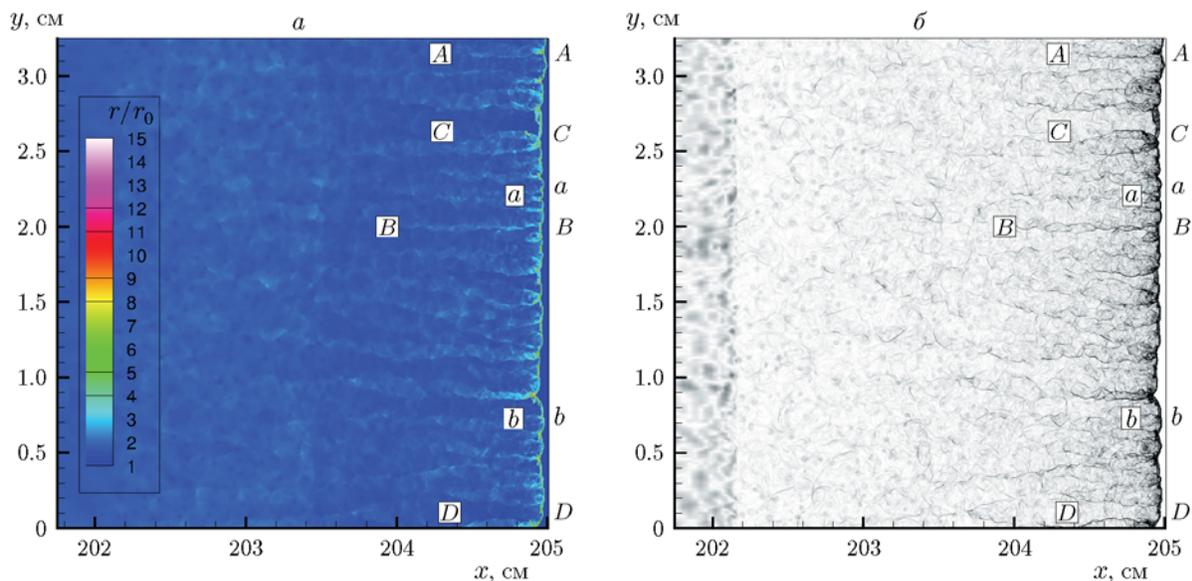


Рис. 1. Структура фронта ДВ в канале высотой  $H = 3.25$  см:  
*a* — поле нормализованной плотности, *б* — численная шпирен-визуализация

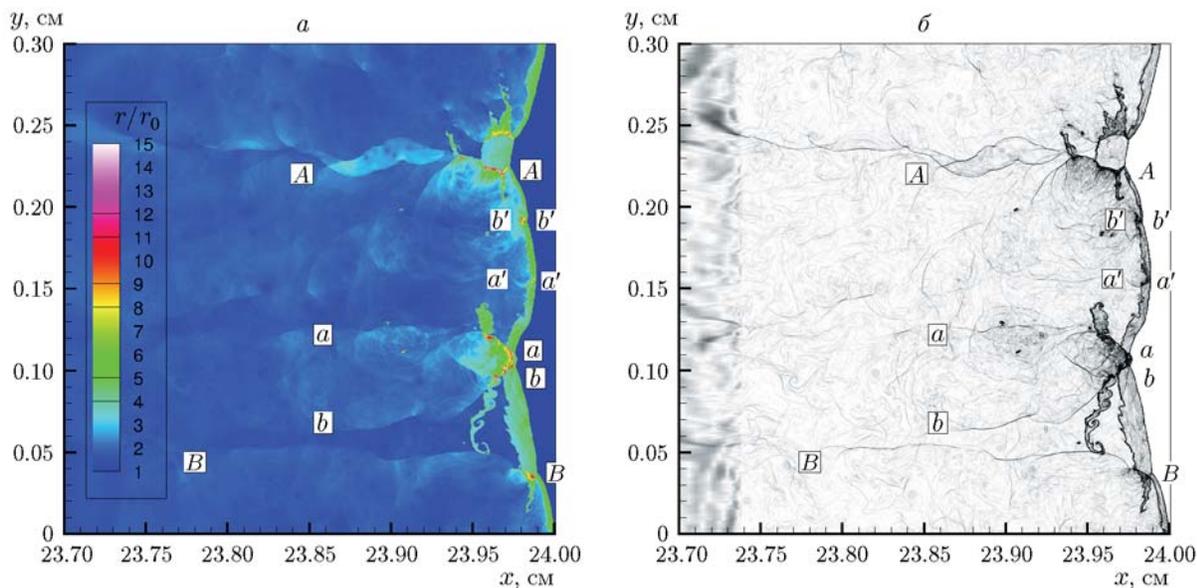


Рис. 2. Структура фронта ДВ в канале высотой  $H = 0.3$  см:  
*a* — поле нормализованной плотности, *б* — численная шпирен-визуализация

Также на фронте имеется несколько вторичных ПВ, например *aa* и *bb*. Заметно значительное количество третичных (*a'a'* и *b'b'*) и еще более мелких ПВ (см. рис. 2, *б*). Исходя из анализа этого и других полей течения, а также динамики движения основных ПВ при  $H = 0.3$  см, можно сделать вывод, что данный размер канала близок, но несколько превышает поперечный размер детонационной ячейки  $a_0$ , т. е.  $a_0 \leq$

0.3 см. Для уточнения значения  $a_0$  были проведены двумерные вычисления при меньших размерах канала.

На рис. 3 представлена полученная в результате серии расчетов конфигурация с двумя основными ПВ: *AA* и *BB*, практически симметричными и двигающимися в противофазе, как это и должно быть в классической ячеистой многофронтной структуре ДВ. На ри-

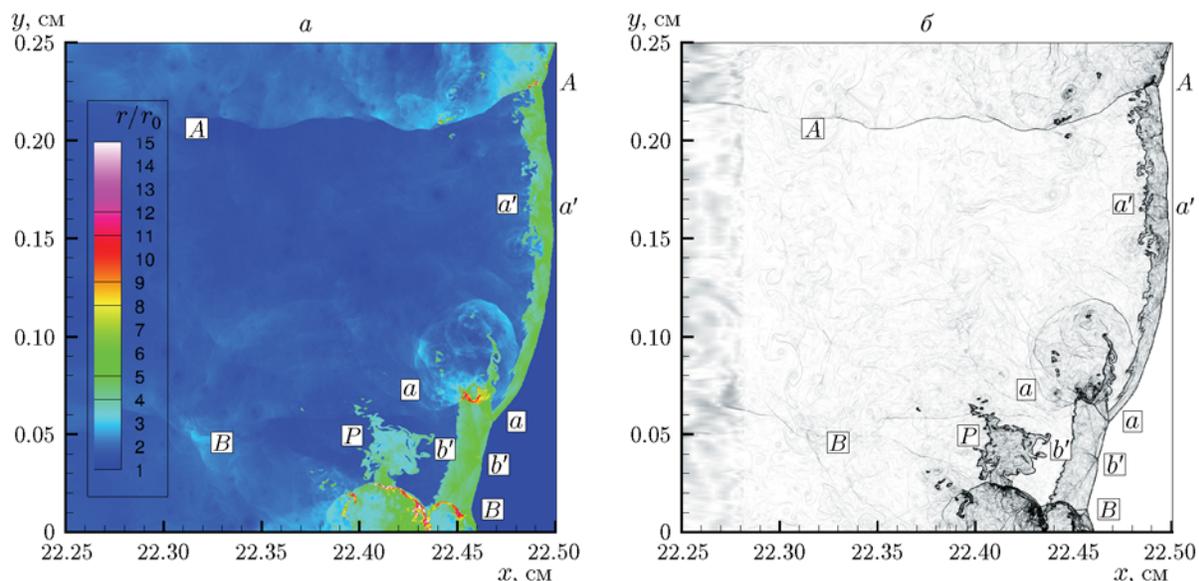


Рис. 3. Структура фронта ДВ в канале высотой  $H = 0.25$  см:  
 а — поле нормализованной плотности, б — численная шпирен-визуализация

сунке показаны также вторичные и третичные ПВ ( $aa$ ,  $a'a'$  и т. д.). Кроме того, наблюдается пакет несгоревшего газа  $P$  за фронтом лидирующей ударной волны. Периодическое формирование таких пакетов отмечалось нами ранее при моделировании многофронтовых ДВ в метановых смесях [2]. Заметим, что интенсивность основных ПВ при данной высоте канала все же отличается, что свидетельствует о том, что размер канала подобран не идеально точно и  $a_0 \geq 0.25$  см. Отметим, что полученное значение  $a_0$  хорошо соответствует расчету по общепринятой аналитической модели детонационной ячейки Васильева — Николаева [6].

Дополнительно было выполнено двумерное моделирование структуры ДВ в стехиометрической воздушной смеси синтез-газа с воздухом вида  $(1 - \alpha)CO + \alpha H_2 + 0.5Air$  при стандартных начальных условиях. Рассмотрены смеси с двумя концентрациями водорода. Получено, что при  $\alpha = 0.3$  поперечный размер детонационной ячейки равен  $a_0 = 0.35$  см, а при  $\alpha = 0.1$  составляет  $a_0 = 1.2$  см. Многофронтная структура фронта ДВ качественно совпадает со структурой волны в кислородной смеси, т. е. является умеренно нерегулярной.

### ВЫВОДЫ

Предложена приведенная двустадийная модель химической кинетики детонационно-

го сгорания синтез-газа. На ее основе выполнен двумерный численный расчет ДВ в смеси  $0.9CO + 0.1H_2 + 0.5O_2$ . Ячеистая структура детонационной волны в рассматриваемой смеси нерегулярна. Она характеризуется умеренно хаотическим несогласованным движением основных поперечных волн, многочисленными вторичными (третичными и т. д.) поперечными волнами, составляющими иерархию уменьшающихся по размерам возмущений лидирующего ударного фронта волны, спонтанным формированием областей непрореагировавшего газа за фронтом волны. Размер детонационной ячейки в рассматриваемой смеси составляет  $0.25 \leq a_0 \leq 0.3$  см. Он хорошо соответствует размеру  $a_0$ , рассчитанному по аналитической формуле Васильева — Николаева [6].

Отметим, что экспериментальный размер ячейки в стехиометрической водородокислородной смеси  $H_2 + 0.5O_2$  при стандартных начальных условиях составляет  $1.4 \div 1.6$  мм [7]. Структура ДВ в такой смеси является регулярной. Таким образом, как следует из выполненных расчетов, сильное разбавление водородокислородной смеси оксидом углерода приводит к значительному возрастанию размера ячейки. При этом регулярная многофронтная структура ДВ сменяется нерегулярной.

Проведенные расчеты детонационной структуры в смеси синтез-газа с воздухом показали, что разбавление водородовоздушной

смеси оксидом углерода также приводит к значительному возрастанию размера ячейки. Это качественно согласуется с известными экспериментальными данными [5]. Разбавление рассматриваемой смеси оксидом углерода аналогичным образом приводит к возрастанию степени нерегулярности многофронтной структуры ДВ.

Численные расчеты были проведены на высокопроизводительных вычислительных системах МВС-10П ОП и МВС-100К в Межведомственном суперкомпьютерном центре Российской академии наук (МЦЦ РАН).

### ЛИТЕРАТУРА

1. **Троцюк А. В.** Численное моделирование структуры двумерной газовой детонации смеси  $H_2-O_2-Ar$  // Физика горения и взрыва. — 1999. — Т. 35, № 5. — С. 93–103.
2. **Fomin P. A., Trotsyuk A. V., Vasil'ev A. A.** Approximate model of chemical reaction kinetics for detonation processes in mixture of  $CH_4$  with air // Combust. Sci. Technol. — 2014. — V. 186, N 10-11. — P. 1716–1735.
3. **Гардинер У., Диксон-Льюис Г., Целнер Р., Трое Ю., Варнатц Ю., Хэнсон Р., Салимьян С., Френклах М., Буркат А.** Химия горения. — М.: Мир, 1988.
4. **Николаев Ю. А., Зак Д. В.** Согласование моделей химических реакций в газах со вторым началом термодинамики // Физика горения и взрыва. — 1988. — Т. 24, № 4. — С. 87–90.
5. **Васильев А. А.** Задержка воспламенения в многотопливных смесях // Физика горения и взрыва. — 2007. — Т. 43, № 3. — С. 42–46.
6. **Николаев Ю. А., Васильев А. А., Ульяновский В. Ю.** Газовая детонация и ее применение в технике и технологиях (обзор) // Физика горения и взрыва. — 2003. — Т. 39, № 4. — С. 22–54.
7. **Васильев А. А.** Околокритические режимы газовой детонации: дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.17 / Ин-т гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН. — Новосибирск, 1995.
8. **Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П.** Численное решение многомерных задач газовой динамики. — М.: Наука, 1976.
9. **Yamamoto S., Daiguji H.** Higher-order-accurate upwind schemes for solving the compressible Euler and Navier — Stokes equations // Computer Fluids. — 1993. — V. 22, N 2/3. — P. 259–270.
10. **Daiguji H., Yuan X., Yamamoto S.** Stabilization of higher-order high resolution schemes for the compressible Navier — Stokes equation // Int. J. Numer. Methods for Heat and Fluid Flow. — 1997. — V. 7, N 2/3. — P. 250–274.
11. **Chakravarthy S. R., Osher S.** A new class of high accuracy TVD schemes for hyperbolic conservation laws // Proc. of the AIAA 23rd Aerospace Sciences Meeting, Reno, Nevada, 1985. — AIAA Paper. — 1985. — № 85-0363.
12. **Lin S.-Y., Chin Y.-S.** Comparison of higher resolution Euler schemes for aeroacoustic computations // AIAA Journal. — 1995. — V. 33. — P. 237–245.
13. **Batten P., Leschziner M. A., Goldberg U. C.** Average-state Jacobians and implicit methods for compressible viscous and turbulent flows // J. Comput. Phys. — 1997. — V. 137, N 1. — P. 38–78.
14. **Coquel F., Perthame B.** Relaxation of energy and approximate Riemann Solvers for general pressure laws in fluid dynamics // SIAM J. Numer. Anal. — 1998. — V. 35, N 6. — P. 2223–2249.
15. **Shen J. W., Zhong X.** Semi-implicit Runge — Kutta schemes for non-autonomous differential equations in reactive flow computations // Proc. AIAA 27th Fluid Dynamics Conf., New Orleans, LA, June 17–20, 1996. — AIAA Paper. — 1996. — N 96-1969.

*Поступила в редакцию 08.10.2018.*

*После доработки 11.12.2018.*

*Принята к публикации 20.02.2019.*