

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДИАМЕТРА ТРУБЫ НА РЕЖИМ РАСПРОСТРАНЕНИЯ И СТРУКТУРУ ДЕТОНАЦИИ В СМЕСЯХ С ДВУХСТАДИЙНЫМ ТЕПЛОЫДЕЛЕНИЕМ И ДВУХУРОВНЕВОЙ ЯЧЕИСТОЙ СТРУКТУРОЙ

Ф. Виро, Б. А. Хасаинов, Д. Деборд, А.-Н. Прель

Лаборатория горения и детонации, Подразделение № 9028 Национального центра научных исследований Франции, Высшая национальная школа механики и аэротехники, 86961 Фютюроскоп, Франция
florent.virot@lcd.ensma.fr

Численно исследована ячеистая структура детонации в реагирующих смесях, тепловыделение в которых реализуется в два этапа, сильно различающихся характерными временами. Ячеистая структура в смесях такого типа при определенных условиях является двухуровневой. При уменьшении диаметра трубы многоголовая двухуровневая ячеистая детонационная структура сменяется двухуровневой структурой со спином, соответствующим второму (медленному) экзотермическому этапу реакции, затем одноячейковой структурой и, наконец, спиновой модой распространения поперечной волны, соответствующей первому (быстрому) этапу реакции. Впервые представлены результаты трехмерного численного исследования детонации таких смесей. Хотя использовавшееся численное разрешение не позволило описать тонкую структуру в начале больших детонационных ячеек, результаты расчетов качественно согласуются с экспериментом.

Ключевые слова: детонация, двухуровневая ячеистая структура, двухстадийное тепловыделение.

ВВЕДЕНИЕ

В типичных газовых реагирующих смесях (например, смеси H_2 или C_nH_m с O_2) детонация характеризуется одноуровневой периодической ячеистой структурой (рис. 1, а), так как химическая энергия выделяется одностадийным образом. Типичный характерный размер этой структуры λ связан с законом тепловыделения и пропорционален длине зоны индукции; тем самым он является характеристикой детонационной способности различных смесей. Таким образом, размер λ зависит от начальных давления и температуры (p_0 , T_0) и возрастает при уменьшении начального давления смеси.

Максимальный размер ячейки детонации, распространяющейся в трубе внутреннего диаметра d , не может быть больше значения $\lambda = \pi d$. Этот режим, называемый спиновой детонацией, существует в узком диапазоне начальных давлений p_0 . Дальнейшее снижение давления p_0 делает невозможным распространение детонации.

Однако в газообразном нитрометане [1] и в богатых смесях H_2 или C_nH_m с NO_2 [2], в которых химическая энергия выделяется в две последовательные стадии, ячеистая структура детонации имеет двухуровневый характер (рис. 1, б). Ниже такие смеси будем называть двухстадийными с двухуровневой структурой. Ранее в работе [3] было выполнено двумерное численное исследование структуры детонации в таких смесях и получено качественное согласие с экспериментом. Численное моделирование однозначно показывает, что тип детонационной структуры (одно- или двухуровневая) тесно связан с законом тепловыделения. Вдали от геометрических ограничений одноуровневая структура соответствует одностадийному выделению тепла, двухуровневая — выделению тепла в два этапа с сильно различающимися характерными временами.

Цель работы состоит в численном трехмерном моделировании структуры детонации в смеси с двухстадийным тепловыделением и двухуровневой ячеистой детонационной структурой. До сих пор спиновая детонация численно исследовалась только в случае одностадийного тепловыделения [4–6].

F. Viro, B. Khasainov, D. Desbordes, H.-N. Presles.
Laboratoire de Combustion et de Detonique, UPR 9028
Centre Nationale de la Recherche Scientifique, École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, BP 40109, 86961 Futuroscope, France.

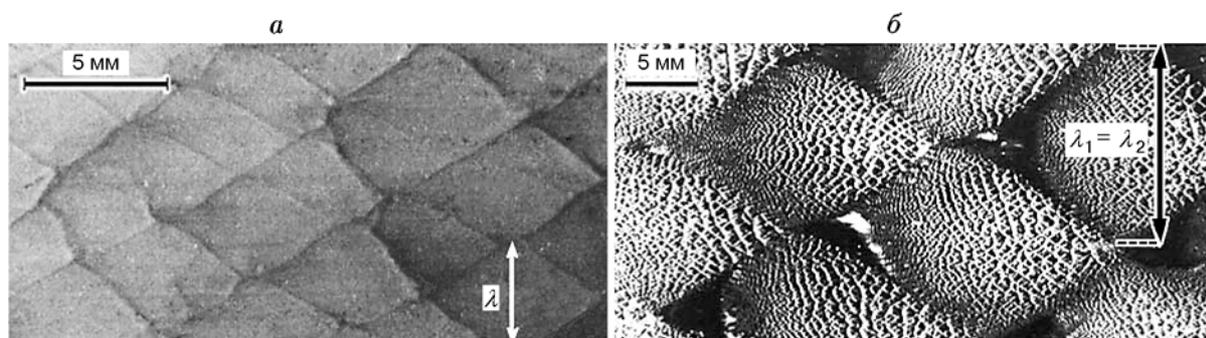


Рис. 1. Экспериментальные следовые отпечатки на стенках детонационной трубы:
a — одностадийная реакция (H_2/O_2 , коэффициент избытка горючего $\phi = 1$, $p_0 = 0.3$ бар), *б* — двухстадийная реакция и двухуровневая структура (H_2/NO_2 , $\phi = 1.2$, $p_0 = 1$ бар)

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД И МОДЕЛЬ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Для численного решения нестационарных уравнений Эйлера использовалась программа EFAE (Enhanced fuel air explosion). Модель тепловыделения включает две последовательные экзотермические аррениусовские реакции $A \rightarrow B \rightarrow C$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0;$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{V}}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{V} : \mathbf{V} = -\nabla p;$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (E + p) \mathbf{V} = 0.$$

Здесь $E \equiv \rho[e + \mathbf{V} \cdot \mathbf{V}/2 + Q_1 a + Q_2(1 - c)]$;

$$\frac{\partial \rho a}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho a \mathbf{V}) = -\rho^2 Z_1 a \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right);$$

$$\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho c \mathbf{V}) = -\rho^2 Z_2 (1 - a - c) \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right),$$

где $b = 1 - a - c$ — массовая доля промежуточного продукта реакции B , a и c — массовые доли непрореагировавшей свежей смеси A и окончательного продукта реакции C , $a = 1$, $b = 0$ и $c = 0$ при $t = 0$, ρ — плотность, \mathbf{V} — вектор скорости, e — внутренняя энергия, E — полная энергия, E_1 , E_2 — энергии активации, Q_1 , Q_2 — тепловые эффекты реакций, Z_1 , Z_2 — предэкспоненты, R — универсальная газовая постоянная, t — время.

Важно отметить, что данная двухстадийная кинетическая модель отличается от двухстадийной модели, предложенной в [7] и позднее улучшенной в работе [8]. Действительно, в нашем случае каждая из двух стадий реакции является экзотермической в противоположность вышеперечисленным моделям, в которых первый этап реакции представляет собой термически нейтральный период индукции.

Программа EFAE использует метод коррекции потоков FCT, разработанный в [9]. Цилиндрическая детонационная труба дискретизируется в декартовых прямоугольных координатах. На стенках трубы ставится условие скольжения потока. Теплотери в стенку трубы не учитываются. Каждый расчет начинается с двумерного случая, причем для иницирования течения используется точечный взрыв при $x = 0$. Энергия точечного взрыва выбирается таким образом, чтобы инициировать слегка пересжатый режим детонации, релаксирующий впоследствии к режиму Чепмена — Жуге, соответствующему полному выделению химической энергии обеих стадий. После того как детонация становится квазистационарной, полученное двумерное решение воспроизводится на трехмерную область течения в трубе, определяя тем самым начальное распределение параметров потока в трехмерном решении.

Течение газа в трубе рассматривается от закрытого торца трубы при $x = 0$ вплоть до свежей смеси перед фронтом детонации. Так как длина рассматриваемой области растет со временем, то программа EFAE использует метод адаптации вдоль направления течения по

Таблица 1

Диаметр трубы (d), размерность численной сетки и результаты расчетов:
тип детонационной структуры, число (N_1) детонационных ячеек,
соответствующих первой стадии химической реакции, и их размер (λ_1)

Вариант расчета	d , мм	Количество ячеек по осям x, y, z	Тип структуры	N_1	λ_1 , мм
I	26.25	$500 \times 175 \times 175$	Двухуровневая/многоголовая	—	—
II	22.5	$500 \times 150 \times 150$	Двухуровневая/спиновая, соответствующая 1-му этапу	—	—
III	15	$500 \times 100 \times 100$	Одноуровневая/многоголовая	$3 \div 4$	$3.7 \div 5$
IV	7.5	$500 \times 50 \times 50$	Одноуровневая/многоголовая	1.5	5
V	5.25	$500 \times 35 \times 35$	Одноуровневая/многоголовая	1	5.25
VI	3	$500 \times 20 \times 20$	Одноуровневая/спиновая, соответствующая 2-му этапу	0.5	6

оси трубы x . А именно, половина ячеек сетки вдоль оси x около детонационного фронта имеет постоянный и наименьший размер (Δx_{fine}), а размер второй половины ячеек монотонно увеличивается по закону геометрической прогрессии от конца зоны максимального разрешения к закрытому торцу трубы при $x = 0$. При этом второй этап реакции завершается еще в зоне высокого разрешения.

Представленные ниже результаты расчетов получены при следующих значениях входных параметров: $p_0 = 0.05$ бар, $T_0 = 298$ К, показатель адиабаты $\gamma = 1.25$, молекулярная масса $W_m = 0.0303$ кг/моль, $\Delta x_{fine} = 0.15$ мм, предэкспоненциальные факторы первой и второй стадий соответственно $Z_1 = 4 \times 10^{10}$ м³/(кг·с) и $Z_2 = 6 \cdot 10^8$ м³/(кг·с). Скорость и давление детонации Чепмена — Жу́ге в рассматриваемой смеси составляют $D_{CJ} = 2271$ м/с и $p_{CJ} = 1.42$ бар. Энергии активации и тепловые эффекты приняты одинаковыми для обеих стадий: $E_1 = E_2 = 250$ кДж/моль и $Q_1 = Q_2 = Q_{CJ}/2 = 2.2$ МДж/кг.

ВЛИЯНИЕ ДИАМЕТРА ТРУБЫ НА ТРЕХМЕРНУЮ СТРУКТУРУ ДЕТОНАЦИИ В СМЕСИ С ДВУХСТАДИЙНЫМ ТЕПЛОЫДЕЛЕНИЕМ И ДВУХУРОВНЕВОЙ ЯЧЕИСТОЙ СТРУКТУРОЙ

Рассмотрим трехмерную структуру детонации в реагирующей смеси, свойства которой и начальное состояние описаны выше. Геометрические условия, при которых проводились расчеты, а также некоторые результаты расчетов приведены в табл. 1. Соответствующие

«численные следовые отпечатки» на стенке трубы показаны на рис. 2.

В случае трубы наибольшего размера (вариант I) наблюдается многоголовая двухуровневая детонационная структура: видно, что большие ячейки размером $\lambda_2 = d$ заполнены маленькими ячейками переменного размера. Действительно, маленькие детонационные ячейки подвержены влиянию изменения скорости волны по длине большой ячейки. В результате мелкомасштабные ячейки должны были бы иметь очень маленький размер в начале большой ячейки (где сталкиваются поперечные волны, соответствующие крупной структуре). Однако численный расчет из-за недостатка численного разрешения не способен полностью воспроизвести наблюдаемое в опыте поведение маленьких ячеек.

Выясним теперь, что произойдет при уменьшении диаметра трубы. Рассмотрим вариант II — спиновый детонационный режим. «Расчетные следовые отпечатки» показывают наличие периодических полос, наклон которых относительно оси трубы составляет 45° , а расстояние между ними (шаг спина) равно примерно πd (в данном случае ≈ 7 см), как в случае классической спиновой детонации. Однако в исследуемой смеси с двухстадийным выделением химической энергии появляется двухуровневая детонационная структура, как в экспериментах [10]. Хотя тонкая структура детонации не разрешена столь хорошо, как хотелось бы, в данном численном трехмерном расчете впервые получено качественное согласие с экспериментальными результатами [10].

При меньших диаметрах трубы (вари-

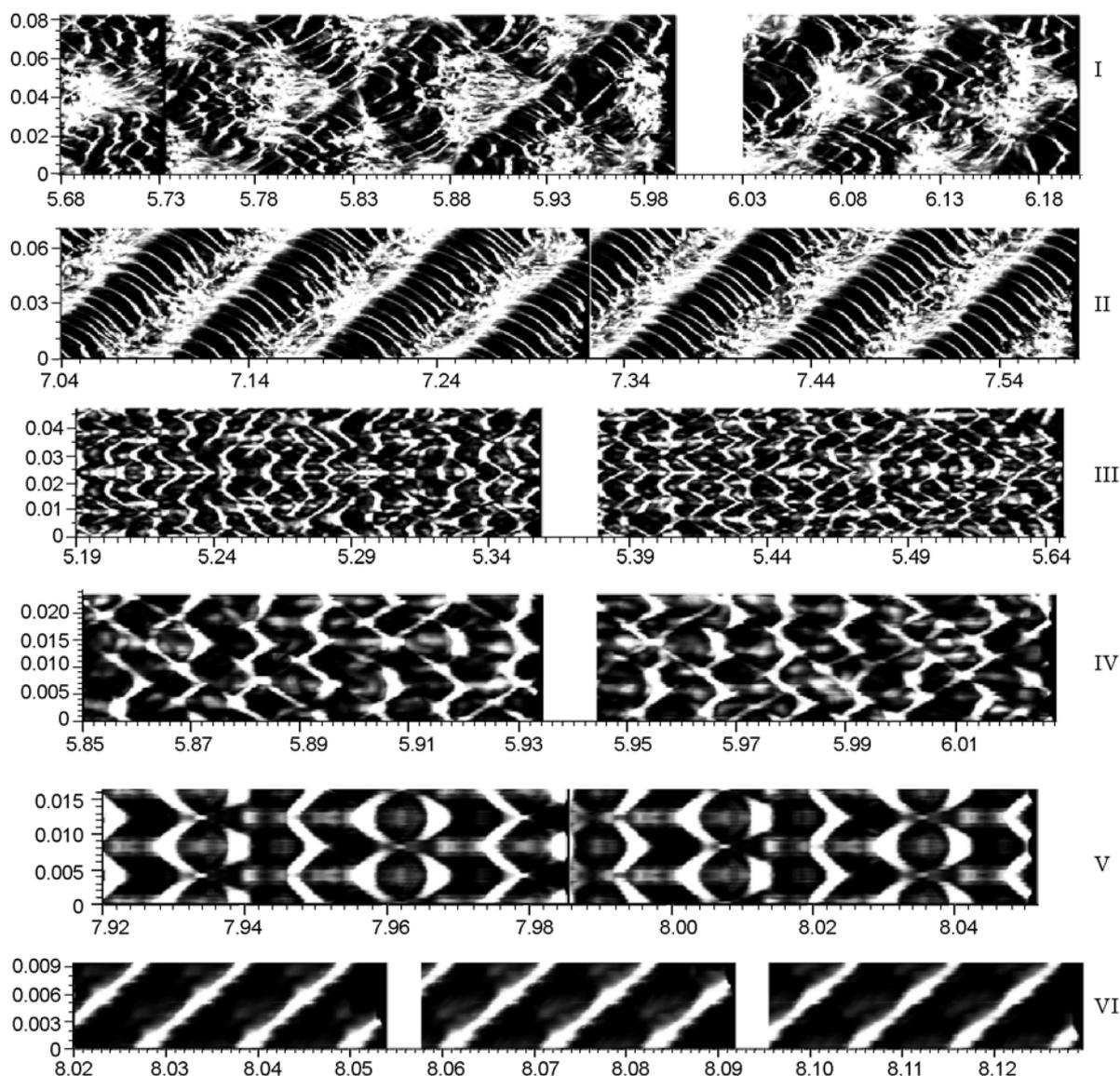


Рис. 2. Расчетные поля максимального давления на поверхности детонационной трубы («численные следовые отпечатки»): детонация распространяется слева направо; единицей длины по горизонтальной и вертикальной осям является метр

анты III–VI) расчет показывает наличие лишь одноуровневой детонационной структуры. Крупномасштабная структура с размером ячеек λ_2 исчезает, и наблюдается только одноуровневая структура с размером λ_1 , который соответствует первой экзотермической стадии химической реакции, поддерживаемой, однако, и тепловыделением второй стадии. Более того, видно, что ячеистая структура детонации довольно нерегулярна в варианте III. Однако

она становится все более регулярной по мере уменьшения диаметра трубы и приближения к спиновому режиму распространения детонации. Детонация становится спиновой в варианте VI: шаг спина равен ≈ 10.5 мм ($\pi d = 9.3$ мм), а угол наклона — $\approx 45^\circ$.

На рис. 3 показан фронтальный вид структуры детонации. Действительно, полупрозрачные изоповерхности давления позволяют визуализировать зоны высокого давления в окрест-

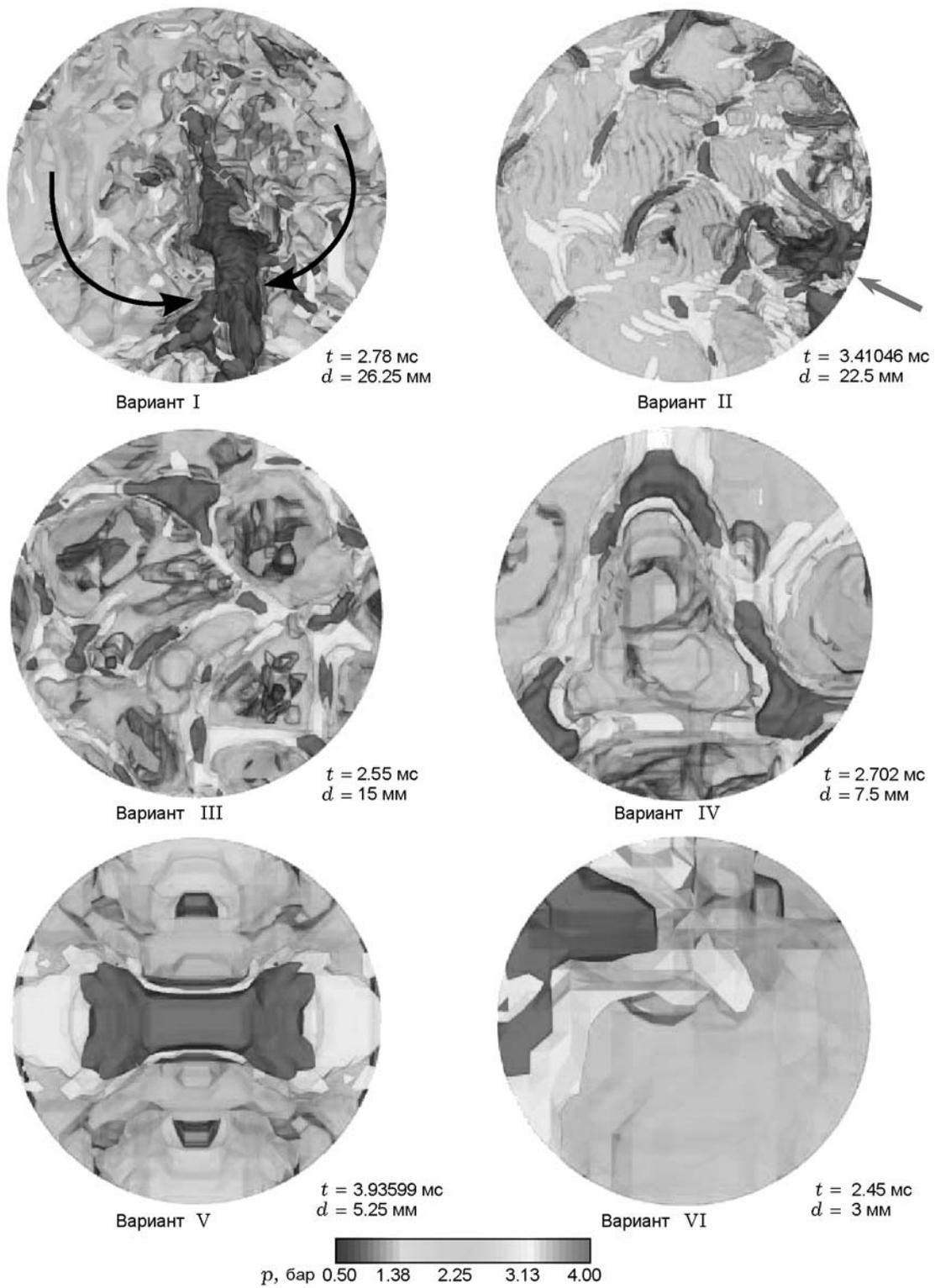


Рис. 3. Фронтальный вид изоповерхностей давления

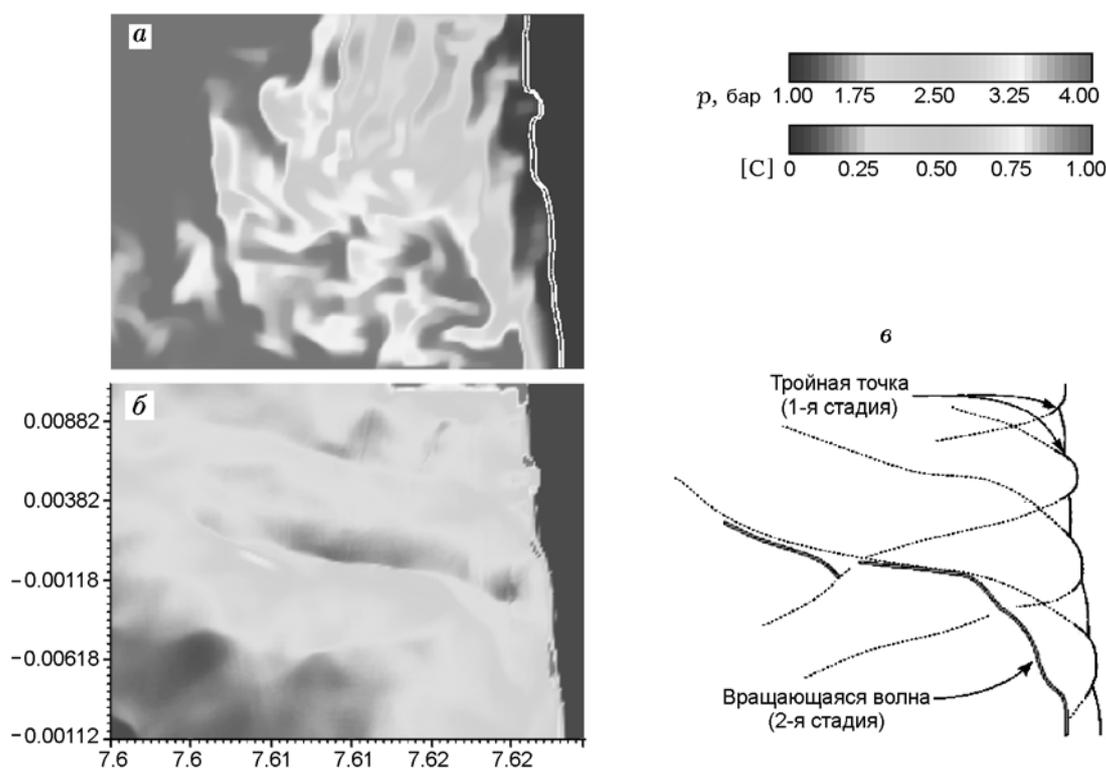


Рис. 4. Пространственные распределения концентрации конечного продукта (*a*) и давления (*б*) в плоскости $z = 0$ (вариант II) в момент времени $t = 3.411$ мс, а также схема профиля давления (*в*):

a — светлые линии — контуры значений $a = 0.1$ и $a = 0.9$; *б* — единицей длины по горизонтальной и вертикальной осям является метр

ности тройных точек. Очевидно, эти мгновенные пространственные распределения давления при разных значениях диаметра трубы согласуются с вышеприведенными следовыми отпечатками и представляют собой дополнительные данные для анализа структуры детонации.

- В трубе наибольшего диаметра (вариант I) поперечные волны, приходящие слева и справа (показаны стрелками), сталкиваются примерно в центре трубы, в то время как в варианте II существует только одна тройная точка, соответствующая второй экзотермической стадии. Эта тройная точка, вращающаяся против часовой стрелки, ясно видна на рис. 3 (вариант II) в положении, соответствующем указанию стрелки на 16 ч.

- В трубах меньшего диаметра наблюдаются лишь одноуровневые ячеистые структуры, что позволяет оценить размер ячеек λ_1 . Как показывают результаты, приведенные в табл. 1, средний размер ячеек близок к 5 мм.

Наконец, рис. 4 и 5 иллюстрируют мгновенные распределения концентрации конечного продукта реакции (вверху) и давления (внизу) в диаметральной плоскости детонационных труб различного диаметра и предоставляют дополнительную информацию для интерпретации вышеприведенных результатов. Во всех случаях первая стадия химической реакции $A \rightarrow B$ является очень быстрой: ширина ее зоны, ограниченная двумя белыми линиями на рисунках, составляет примерно $0.3 \div 0.7$ мм, что гораздо меньше ширины зоны второй химической реакции $B \rightarrow C$, которая завершается на расстоянии $10 \div 20$ мм от фронта детонации.

Тем не менее детонация поддерживается тепловыделением обеих стадий, что обеспечивает ее распространение со скоростью Чепмена — Жуге, поскольку потери энергии в модели не учитывались.

В трубах относительно малого диаметра (варианты III–VI) детонационная структура,

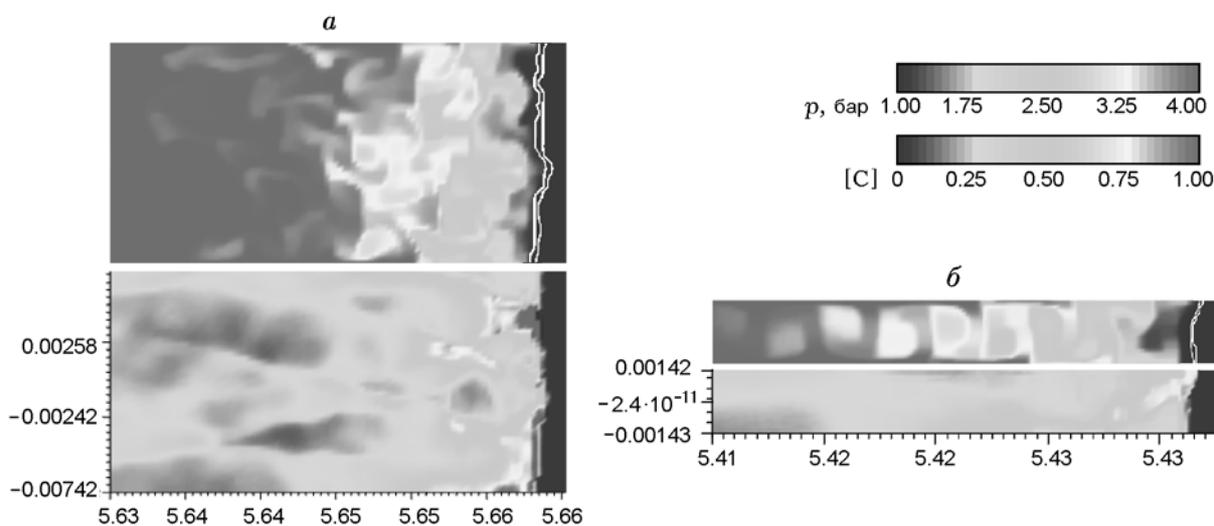


Рис. 5. Пространственные распределения концентрации конечного продукта и давления в плоскости $z = 0$ в вариантах III (а) и VI (б):

а — $t = 2.55$ мс, светлые линии — контуры значений $a = 0.1$ и $a = 0.9$; б — $t = 2.45$ мс; по горизонтальным и вертикальным осям длина дана в метрах

соответствующая второму этапу реакции, исчезает, поскольку ее характерный размер велик по сравнению с диаметром трубы ($\lambda_2 \gg \pi d$). Таким образом, вторая стадия реакции перестает влиять на первую и детонационный фронт выглядит так же, как в случае смеси с одностадийным выделением тепла: течение газа в зоне превращения промежуточного продукта В в окончательные продукты реакции является практически квазиодномерным, а слабые градиенты в поперечных направлениях y и z обязаны, в основном, поперечным волнам, образующим мелкомасштабные детонационные ячейки. Тем не менее это не значит, что энергия, выделяющаяся на второй стадии, не идет на поддержание распространения детонации. Если бы в расчете были приняты во внимание теплотери (имеющие место в реальности), то тогда часть химической энергии, соответствующая второй стадии, была бы потеряна и детонация распространялась бы в низкоскоростном режиме, как это наблюдали экспериментально в работах [10, 11], а численно — в [3].

ВЫВОДЫ

Путем численного моделирования исследовано влияние диаметра трубы на ячеистую структуру детонации в смеси, в которой вы-

деление тепла происходит в две стадии. В дополнение к результатам двумерных расчетов [3] данное исследование ясно показывает, в качественном согласии с экспериментальными данными, сосуществование спинового режима распространения поперечной волны, индуцированной второй (медленной) стадией химической реакции, с многоголовой детонационной ячеистой структурой, соответствующей первой (быстрой) стадии реакции.

Табл. 2 иллюстрирует эволюцию структуры детонации и режима ее распространения при увеличении обратного диаметра трубы. Эта схема без опасений может быть обобщена и для иллюстрации влияния обратного начального давления смеси.

Таблица 2

Изменение структуры и режима распространения детонации при увеличении обратного диаметра трубы (или обратного начального давления)

Направление возрастания d^{-1} (или p_0^{-1}) \rightarrow			
Двухуровневая ячеистая структура		Одноуровневая ячеистая структура	
λ_1 , МГ	λ_1 , МГ	λ_1 , МГ	λ_1 , спиновая
λ_2 , МГ	λ_2 , спиновая		

Примечание. МГ — многоголовая детонация.

Проведенное исследование является первой попыткой численного анализа структуры детонации в смесях с двухстадийным выделением тепла. Хотя тонкую структуру течения в начале больших ячеек не удалось численно разрешить при использованных умеренных затратах машинного времени на трехмерный расчет, качественное согласие с экспериментом получено.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Presles H.-N., Desbordes D., Guirard M., Guerraud G.** Gaseous nitromethane and nitromethane-oxygen mixtures: a new detonation structure // *Shock Waves*. — 1996. — V. 6. — P. 111–114.
2. **Joubert F., Desbordes D., Presles H.-N.** Detonation cellular structure in $\text{NO}_2/\text{N}_2\text{O}_4$ -fuel gaseous mixtures // *Combust. Flame*. — 2008. — V. 152. — P. 482–495.
3. **Guilly V., Khasainov B., Presles H.-N., Desbordes D.** Simulation numerique des detonations a double structure cellulaire // *C.r. Mecanique*. — 2006. — V. 334. — P. 679–685.
4. **Washizu T., Fujiwara T.** Numerical Study of Spinning Detonation // 14th ICDERS, D1-9, 1993.
5. **Tsuboi N., Eto K., Hayashi A.** Detailed structure of spinning detonation in a circular tube // *Combust. Flame*. — 2007. — V. 149. — P. 144–161.
6. **Virof F., Khasainov B., Desbordes D., Presles H.-N.** Spinning detonation: experiments and simulations // *Proc. 21st ICDERS*. — Poitiers, France, 2007.
7. **Korobeinikov V. P., Levin V. A.** Propagation of blast waves in a combustible gas // *Astronaut. Acta*. — 1972. — V. 17. — P. 520–437.
8. **Oran E. S., Young T. R., Boris J. P., Cohen A.** Weak and strong ignition. I. Numerical simulations of shock tube experiments // *Combust. Flame*. — 1982. — V. 48. — P. 135–161.
9. **Oran E. S., Boris J. P.** Numerical simulation of reactive flow. — Amsterdam: Elsevier Sci. Publ. Co, Inc., 1987.
10. **Desbordes D., Presles H.-N., Joubert F, Gbagdo Douala.** Etude de la detonation de melanges pauvres $\text{H}_2-\text{NO}_2/\text{N}_2\text{O}_4$ // *C.r. Mecanique*. — 2004. — V. 332. — P. 993–999.
11. **Luche J., Desbordes D., Presles H.-N.** Detonation de melanges $\text{H}_2-\text{NO}_2/\text{N}_2\text{O}_4-\text{Ar}$ // *C.r. Mecanique*. — 2006. — V. 334. — P. 323–327.

Поступила в редакцию 25/X 2008 г.