

УДК 534.222

Численное моделирование детонации в газовых смесях

Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов

*Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского
«Харьковский авиационный институт», г. Харьков, Украина*

Выполнено математическое моделирование нестационарного сгорания смеси химически реагирующих газов в детонационном режиме. Численное решение получено на основе явной конечно-разностной схемы Годунова. Верификация математической модели проведена путем сравнения результатов расчета с известными аналитическими решениями тестовых задач взрыва в постоянном объеме и детонационных условий Чепмена-Жуге в трубе. Получены распределения давления, температуры, концентраций реагирующего газа и продуктов сгорания вдоль расчетной области для метана и водорода. Детонационные величины параметров потока могут быть использованы для оценки воздействия эффектов детонационных взрывов на окружающую среду.

Ключевые слова: математические модели, вычислительные методы, химически реагирующие газы, ударная волна, детонация.

Виконано математичне моделювання нестационарного згорання суміші хімічно реагуючих газів в детонаційному режимі. Чисельне рішення отримано на основі явної кінцево-різницевої схеми Годунова. Верифікація математичної моделі проведена шляхом порівняння результатів розрахунку з відомими аналітичними рішеннями тестових задач вибуху в постійному об'ємі і детонаційних умов Чепмена-Жуге в трубі. Отримані розподіли тиску, температури, концентрацій реагуючого газу і продуктів згорання уздовж розрахункової області для метану і водню. Детонаційні величини параметрів потоку можуть бути використані для оцінки впливу ефектів детонаційних вибухів на навколишнє середовище.

Ключові слова: математичні моделі, обчислювальні методи, хімічно реагуючі газу, ударна хвиля, детонація.

Numerical modeling of unsteady combustion of reactive gases in the detonation regime is implemented. The solution is obtained on the basis of an explicit finite-difference scheme of Godunov. The verification of the mathematical model by comparing the calculation results with the known analytical solutions of test problems of explosions in constant volume and Chapman-Jouguet detonation conditions in the pipe is completed. The distributions of pressure, temperature, concentration of the reacting gas and combustion products along the computational domain for methane and hydrogen are obtained. The detonation values of the flow parameters can be used to assess the effects of detonation explosions on the environment.

Key words: mathematical models, numerical methods, chemically reactive gases, shock waves, detonation.

1. Постановка проблемы и её актуальность

Широкое использование в авиационной, химической, нефтегазодобывающей промышленности и энергетике углеводородных газообразных топлив связано с риском возникновения аварий, сопровождающихся выбросом в атмосферу химически активных газов, формированием взрывоопасных облаков. Воспламенение последних приводит к пожарам, разрушению инфраструктуры предприятий и человеческим жертвам. Часто после воспламенения волна горения, которая движется по непрореагировавшей газовой смеси, переходит из дозвукового режима распространения пламени (дефлаграция) в самоподдерживающийся сверхзвуковой режим (детонация). Газовая среда

продуктов сгорания с детонационными параметрами обладает большим разрушающим потенциалом, поэтому их численная оценка на основе математического моделирования движения химически реагирующих газов является чрезвычайно актуальной проблемой.

Слияние волн сжатия у фронта пламени генерирует ударную волну, которая поддерживает воспламенение при сжатии. Переход горения в детонацию реализуется на определенном расстоянии и зависит от ряда условий: начальной температуры и давления смеси, химической активности, концентрации примеси и геометрии области. Основными характеристиками детонационной волны являются средняя скорость распространения, детонационное давление и температура, ширина зоны реакции [1]. Детонационные режимы горения большинства реагирующих газов похожи, тогда как параметры детонации (скорость и давление) могут существенно отличаться, что позволяет использовать классические теории детонации Чепмена-Жуге (ЧЖ) и Зельдовича для анализа процесса детонации газов [2].

Известны результаты численных исследований процесса газовой детонации в одномерной [3, 4] и двумерной [5] постановках задачи. Обзор по теории и практике численного моделирования движения химически реагирующих газов вообще, и газофазной детонации в частности, представлен в работе [6, 7]. Процессам горения предварительно приготовленных газовых смесей в закрытом пространстве, инициированного температурными неоднородностями, взаимодействия сгенерированных волн давления, посвящены работы [8, 9]. Численному моделированию перехода горения в детонацию метано- и водородо-кислородных стехиометрических смесей посвящена работа [10]. Эффект затухания метано-воздушного пламени на основе модели, построенной на упрощенной схеме химической реакции, был исследован в работе [11]. Вопросам уменьшения негативных эффектов, вызванных распространением детонационной волны, при помощи водяной дисперсии уделено внимание в исследовании [12].

Из анализа литературных источников, посвященных вопросам газофазной детонации, видно, что общепринятым подходом при моделировании рассматриваемых физических процессов является применение компьютерного моделирования движения газов CFD (Computational Fluid Dynamics Methods) на основе решения системы нестационарных уравнений Навье-Стокса для сжимаемого газа, осредненных по Рейнольдсу или Фавру, дополненных моделью турбулентности. Однако большинство моделей турбулентности не описывают с одинаковой степенью адекватности различные типы течений. Особенно это касается течений с интенсивными отрывами потока и/или большими градиентами давления и температуры, что характерно для процессов горения. С другой стороны, рассматриваемый класс задач требует больших вычислительных ресурсов, что не позволяет осуществлять численное моделирование реальных процессов с приемлемыми затратами машинных ресурсов. Поэтому существует необходимость построения новых математических моделей и эффективных вычислительных методов для решения задачи детонационного горения газо-воздушных смесей и использования

результатов моделирования для прогноза последствий взрывов на окружающую среду.

Целью данной работы является разработка математической модели, которая адекватно описывает нестационарные процессы движения смеси химически реагирующих газов в детонационной трубе и эффективного вычисленного метода для решения подобного класса задач. Численное моделирование выполнено для изучения характеристик пламени заранее приготовленных водородо-кислородной и метано-кислородной смесей в полуограниченной области.

2. Общая постановка задачи

Рассматриваются процессы горения стехиометрической смеси горючий газ-кислород в детонационной трубе (рис. 2.1). Известны параметры исходной смеси (температура $T_i=300$ К, давление $P_i=0,1$ МПа, стехиометрическая массовая концентрация горючей примеси Q_r), температура инициирования воспламенения смеси со стороны закрытого торца $T_i=1800$ К. Расчетной областью является одномерное пространство длиной 1 м в направлении OZ, которое разбивается на 1000 вычислительных ячеек.

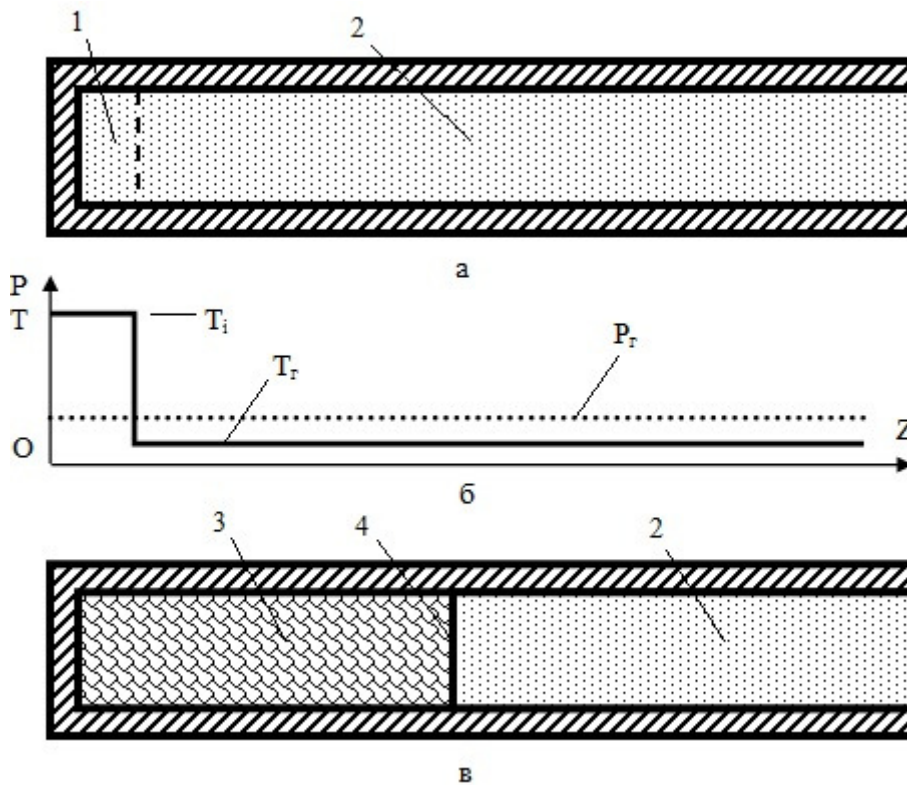


Рис.2.1. Расчетная схема горения в трубе (1 – высокотемпературная зона, 2 – горючая смесь, 3 – продукты сгорания, 4 – фронт пламени): а) состояние перед воспламенением; б) начальное распределение давления и температуры вдоль трубы; в) движение фронта пламени

Высокотемпературная зона создается энергетической «накачкой» ячейки у закрытого торца детонационной трубы до момента воспламенения газовой смеси (достижения температуры инициирования). Далее возникает нестационарный процесс горения при котором энергия, выделившаяся в области реагирующей смеси, генерирует в направлении фронта пламени волны давления с возрастающей амплитудой. Увеличивающийся градиент давления вблизи фронта пламени ускоряет сам фронт и приводит к установившемуся ударному воспламенению.

3. Математическая модель течения смеси газов

Основными признаками формирования детонации является генерирование волн сжатия, их слияние с трансформацией в ударную волну, переход от ламинарного пламени к турбулентному, появление поперечных волн и взаимодействие ударной волны с пограничным слоем [10]. Из этого следует, что полная модель должна быть пространственной. Но для моделирования сверхзвуковых реагирующих течений часто используются одномерные нестационарные модели, которые не рассматривают молекулярные явления, но воспроизводят основные эффекты модели Зельдовича и дают небольшое отклонение от идеальной скорости детонации Чепмена-Жуге [3].

В результате структурного анализа течения и декомпозиции полной математической модели рассматриваемого газодинамического процесса принято допущение о том, что основное влияние на процесс оказывает конвективный обмен массой, импульсом и энергией. Это предположение позволяет для описания движения трехкомпонентного газа (горючее, окислитель и продукты сгорания) с учетом химического взаимодействия компонент смеси использовать усеченные уравнения Навье-Стокса, полученные путем отбрасывания вязких членов (приближение Эйлера с источниковыми членами) [13]. Система уравнений включает законы переноса компонент смеси с учетом скорости диффузии в соответствии с законом Фика (коэффициент диффузии определялся по методике, предложенной М.Е. Берляндом [14]) и замыкается уравнениями, определяющими теплофизические свойства компонент смеси [15].

4. Метод численного решения

Численное решение основных уравнений основывается на использовании схемы распада произвольного разрыва. Использование интегральных законов сохранения массы, импульса, энергии и концентрации компонент смеси в качестве исходных для построения разностных уравнений обеспечивает построение разрывных решений без выделения разрывов.

Совокупность газодинамических параметров во всех ячейках в момент времени t^n представляет собой известное решение на временном слое с индексом n . Параметры в момент времени $t^{n+1} = t^n + \tau$ (на временном слое $n+1$) рассчитывались посредством применения явных разностных аппроксимаций законов сохранения в рамках метода С.К. Годунова [16]. На первом этапе непрерывное распределение параметров заменяется кусочно-постоянными средне-интегральными значениями в каждой расчетной ячейке.

При этом границы ячейки представляют собой неустойчивые поверхности произвольного разрыва, которые распадаются на устойчивые волновые элементы: ударную волну, контактную поверхность и волну разрежения. Для каждого такого разрыва определяются потоки массы, импульса, энергии, концентрации газообразной примеси через грани газовых ячеек. Предполагалось, что горение происходит в объеме расчетной области, занимаемом горючей смесью с концентрацией горючего в диапазоне между минимальным и максимальным концентрационными пределами воспламеняемости $Q_{Г\min} \leq Q_{Г} \leq Q_{Г\max}$. Величины $Q_{Г\min}$ и $Q_{Г\max}$ задавались на основе обобщения экспериментальных данных [17]. Устойчивость конечно-разностной схемы обеспечивается выбором величины шага по времени τ .

На основе предложенных математической модели и вычислительного метода разработана компьютерная система FIRE[®] [18], которая позволяет прогнозировать поля концентрации примеси и других газодинамических параметров смеси во времени и пространстве.

5. Результаты численного моделирования процесса газофазной детонации в трубе

Выходными данными, полученными в результате моделирования процесса газофазной детонации, являются распределения следующих параметров потока вдоль детонационной трубы, которые фиксировались в разные моменты времени после воспламенения:

- давления (рис. 5.1 а, 5.2.а);
- температуры (рис. 5.1 б, 5.2.б);
- массовой концентрации горючего (рис. 5.1 в, 5.2.в);
- массовой концентрации продуктов сгорания (рис. 5.1 г, 5.2.г).

Ударный фронт, за которым следует зоны индукции и реакции, представляет собой типичную структуру детонационной волны. Генерация тепловой энергии в результате химической реакции приводит к росту температуры и уменьшению давления в зоне реакции. Эта зона заканчивается в точке Чепмена-Жуге, в которой достигается химическое равновесие и скорость потока равна звуковой. Критерием достижения детонационного режима является достижение этой точкой стационарного состояния, определяемого теоретическими значениями давления и температуры Чепмена-Жуге. Даже если химический пик (точка Зельдовича-Неймана-Деринга) продолжает расти, значения параметров в точке Чепмена-Жуге во время детонации постоянны.

Давление и температура взрыва в постоянном объеме и для состояния Чепмена-Жуге для стехиометрических смесей метан-кислород и водород-кислород при $P_Г=0,1$ МПа и $T_Г=300$ К были получены в работе [10]. Механизм временной эволюции перехода горения в детонацию подробно описан в [10]. Пламя движется через несгоревший газ, генерируя волны сжатия низкой интенсивности. Этот режим горения локально похож на взрыв в постоянном объеме. Однако существует локальная скорость потока, обусловленная конвективным переносом, зависящим от градиента давления. С течением времени давление за фронтом пламени возрастает, что приводит к ускорению

потока в зоне реакции, сокращению длины зоны индукции и увеличению скорости распространения фронта пламени. Начинает формироваться пик давления, а волны сжатия объединяются, образуя ударный фронт. После того как волна горения догоняет ударную волну, происходит переход к детонации и обе волны движутся совместно. В момент возникновения детонационной волны формируется вторая волна (ретонационная), движущаяся в обратном направлении, сжигающая остаток топлива за ударным фронтом.

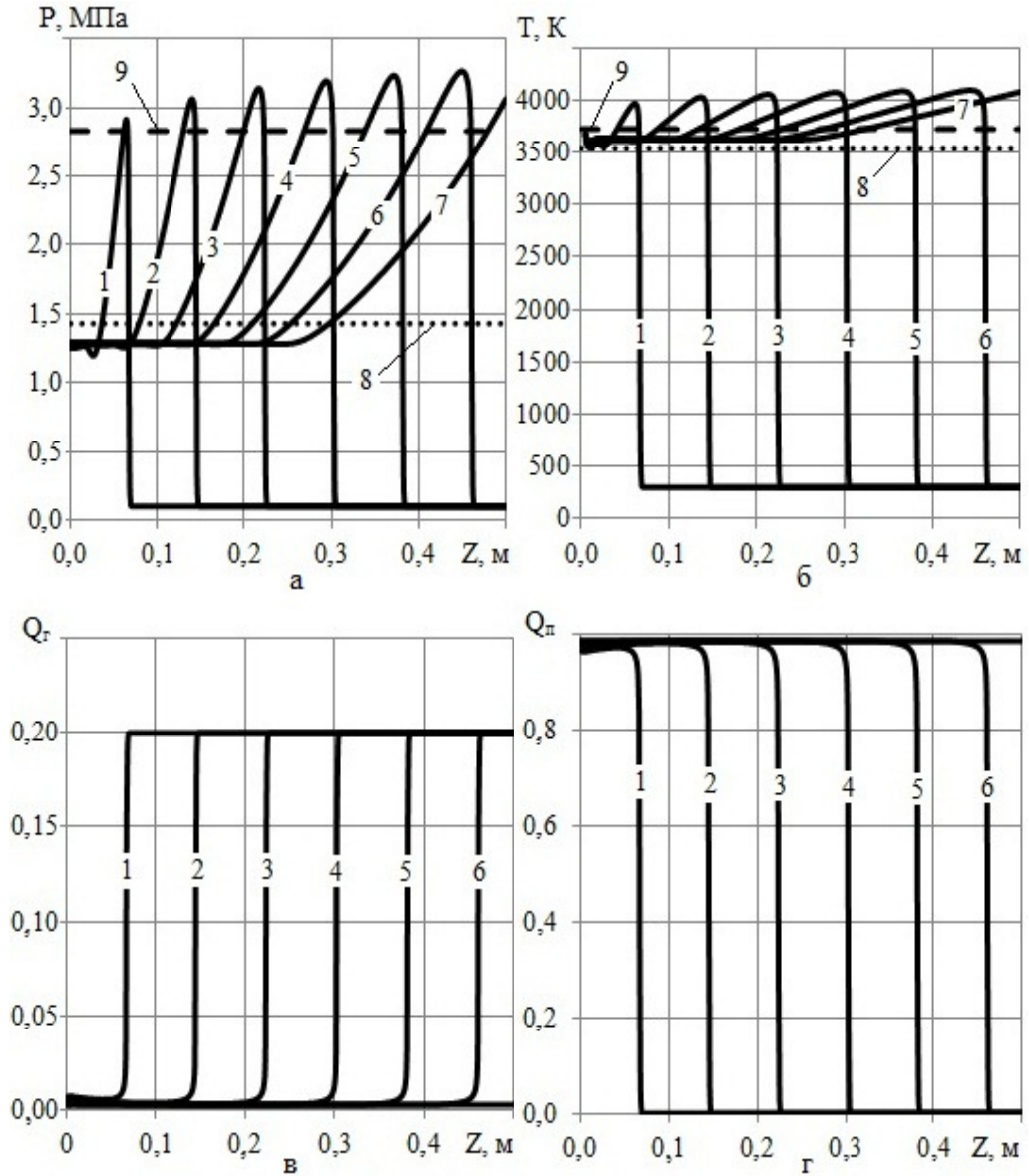


Рис.5.1. Динамика изменения давления (а), температуры (б), концентраций метана (в) и продуктов сгорания (г) в детонационной трубе: 1-7 – моменты времени 30, 60, 90, 120,

150, 180 и 210 мкс; 8 – параметры взрыва при постоянном объеме, 9 – детонационные параметры Чепмена-Жуге

Расчетные параметры горения в состоянии Чепмена-Жуге и в постоянном объеме изображены горизонтальными линиями (рис. 5.1, 5.2). В начальной стадии область воспламенения характеризуется изобарическим поведением и более низким градиентом температуры, что позволяет представлять область горения на этой стадии как взрыв в постоянном объеме. В окрестности детонационной волны параметры потока близки к параметрам в точке Чепмена-Жуге.

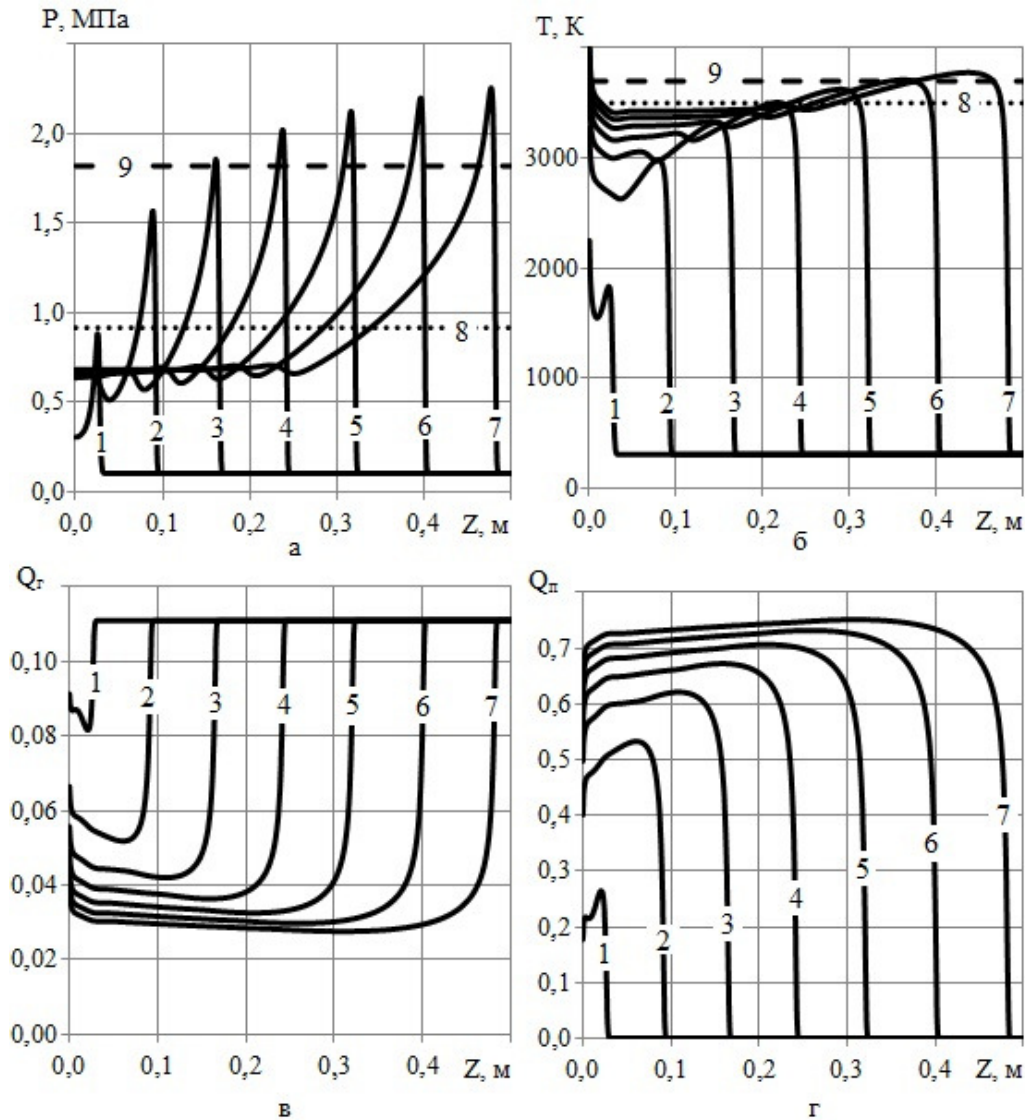


Рис.5.2. Динамика изменения давления (а), температуры (б), концентрации водорода (в) и продуктов сгорания (г) в детонационной трубе: 1-7 – моменты времени 30, 60, 90,

120, 150, 180 и 210 мкс, соответственно; 8 – параметры взрыва при постоянном объеме, 9 – детонационные параметры Чепмена-Жуге

Так как в данной работе используется модель химической реакции «брутто», то химическую структуру пламени можно проследить по изменению распределения вдоль канала массовой концентрации горючего газа и продуктов сгорания (рис. 5.1, в, г и рис. 5.2, в, г). Известно, что при горении большую роль играет химическая структура пламени, обеспечивающая его устойчивое развитие, поскольку химическая кинетика сильно зависит от состава и температуры [11]. Однако при детонации более важным является генерируемый тепловой поток, сохраняющий сверхзвуковые условия [12].

6. Выводы по результатам исследований

На основе разработанной математической модели движения химически реагирующего газа исследовано в одномерной постановке горение, возникающее от горячей точки в полуограниченной области.

Рассмотрены результаты решения задачи горения стехиометрических смесей метан-кислород и водород-кислород в сравнении с равновесными параметрами взрыва в постоянном объеме и в точке Чепмена-Жуге. Исследована динамика изменения давления, температуры, концентрации горючего газа и продуктов сгорания вдоль трубы. Из анализа результатов следует, что структура детонационной волны включает первоначальную область воспламенения, которая ведет себя как взрыв в постоянном объеме и пик, соответствующий точке Чепмена-Жуге.

ЛИТЕРАТУРА

1. Schmitt R.G., Butler P.B. Detonation properties of gases at elevated initial pressures // *Combust. Sci. Technol.* 1995. V. 106. P. 167-193.
2. Westbrook C.K. Chemical kinetics of hydrocarbon oxidation in gaseous detonations // *Combust. Flame.* 1982. V. 46. P. 191-210.
3. Bruls H.K., Lefebvre M.H., Berghmans J. On deriviations from ideal Chapman-Jouguet detonation velocity // *Twenty-Fifth Symp. (Intern.) on Combustion.* Pittsburgh: The combustion Inst., 1994. P. 37-44.
4. Smirnov N.N., Panfilov J.J. Deflagration to detonation transition in combustible gas mixtures // *Combust. Flame.* 1995. V. 101. P. 91-100.
5. Kailasanath K., Oran E.S., Boris J.P., Young T.R. Determination of detonation cell size and the role of transverse waves in two-dimensional detonations // *Combust. Flame.* 1985. V. 61. P. 199-209.
6. Oran E.S., Boris J.P. Numerical Simulation of reactive flow. New York: Elsevier, 1987.
7. Warnatz J., Maas U., Dibble R. W. Combustion Springer, 1996.
8. Weber H.J., Mack A., Roth P. Combustion and pressure wave interaction in enclosed mixture initiated by temperature nonuniformities // *Combust. Flame.* 1994. V. 97. P. 281-295.

9. Bielert U., Sichel M. Numerical simulation of premixed combustion processes in closed tubes // *Combust. Flame*. 1998. V. 114. P.397.
10. Численное моделирование перехода горения в детонацию / М.Т. Парра-Сантос, Ф. Кастро-Руис, Ц. Мендес-Буено // *Физика горения и взрыва*, 2005, т. 41, №2, с. 108-115.
11. Bechtold J.K., Law C.K. Extinction of premixed methane-air flames with reduced reaction mechanism // *Combust. Sci. Technol.* 1990. V. 71. P. 233-245.
12. Thomas G.O., Edwards M.J., Edwards D.H. Studies of detonation quenching by water sprays // *Combust. Sci. Technol.* 1990. V. 71. P.233-245.
13. Computational Modeling of Pressure Effects from Hydrogen Explosions / E.A. Granovskiy, V.A. Lyfar, Yu.A. Skob, M.L. Ugryumov // *Abstracts Book и CD-ROM Proceedings of the 2-nd International Conference on Hydrogen Safety. – San Sebastian (Spain). – 2007. – 15 p. (ICHS Paper No. 1.3.52)*
14. Берлянд М.Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. – Ленинград: Гидрометеиздат, 1975. – 448 с.
15. Скоб Ю. А. Математическое моделирование дефлаграционного горения газовых смесей в помещении / Ю. А. Скоб // *Вестник Харк. нац. ун-та.*, – 2009. – № 863. Сер. "Математическое моделирование. Информационные технологии. Автоматизированные системы управления", вып. 12. – С. 217-235.
16. Численное решение многомерных задач газовой динамики / С.К. Годунов, А.В. Забродин, М.Я. Иванов, А.Н. Крайко, Г.П. Прокопов. – М.: Наука, 1976. – 400 с.
17. Физика взрыва / Под ред. К.П.Станюковича. – М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1975. – 704 с.
18. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 30079 (Україна). Комп'ютерна програма «Комп'ютерна інтерактивна система інженерного аналізу та прогнозу руху хімічно реагуючих газоповітряних сумішей в задачах промислової аеродинаміки та екології атмосфери «FIRE»» [Текст] / Ю.А. Скоб, М.Л. Угрюмов, К.П. Коробчинський. – Дата реєстрації 28.08.2009.