



И.А. Бедарев, А.В. Федоров

Численное моделирование взаимодействия ячеистой детонационной волны с облаком инертных частиц.

*Институт теоретической и прикладной механики
им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск*

«XIII Забабахинские научные чтения», г. Снежинск,
2017



Цель работы:

- Построение методологии расчета детонационных течений в ANSYS Fluent с использованием приведенной кинетики
- Верификация моделей кинетики воспламенения и горения водорода в кислороде по экспериментальным данным
- Анализ численных аспектов моделирования структуры детонационных ячеек
- Разработка в рамках пакета ANSYS Fluent технологии расчетов двумерных детонационных течений в системе реагирующая газовая смесь – инертные частицы для анализа вопросов связанных с подавлением ячеистой детонации.

Математическая модель

Уравнения Навье-Стокса с учетом многокомпонентности газовой смеси и химической кинетики

Брутто-реакция горения стехиометрической смеси водорода в воздухе



Для описания кинетики химических реакции используется одностадийная Аррениусова кинетика:

$$\frac{d\xi_i}{dt} = \chi_i, \quad i=1,2,3$$

где

$$\chi_i = -\nu_i \mu_i \chi$$

$$\chi = \rho^2 k_f \frac{\xi_1^m \xi_2^n}{\mu_1 \mu_2}$$

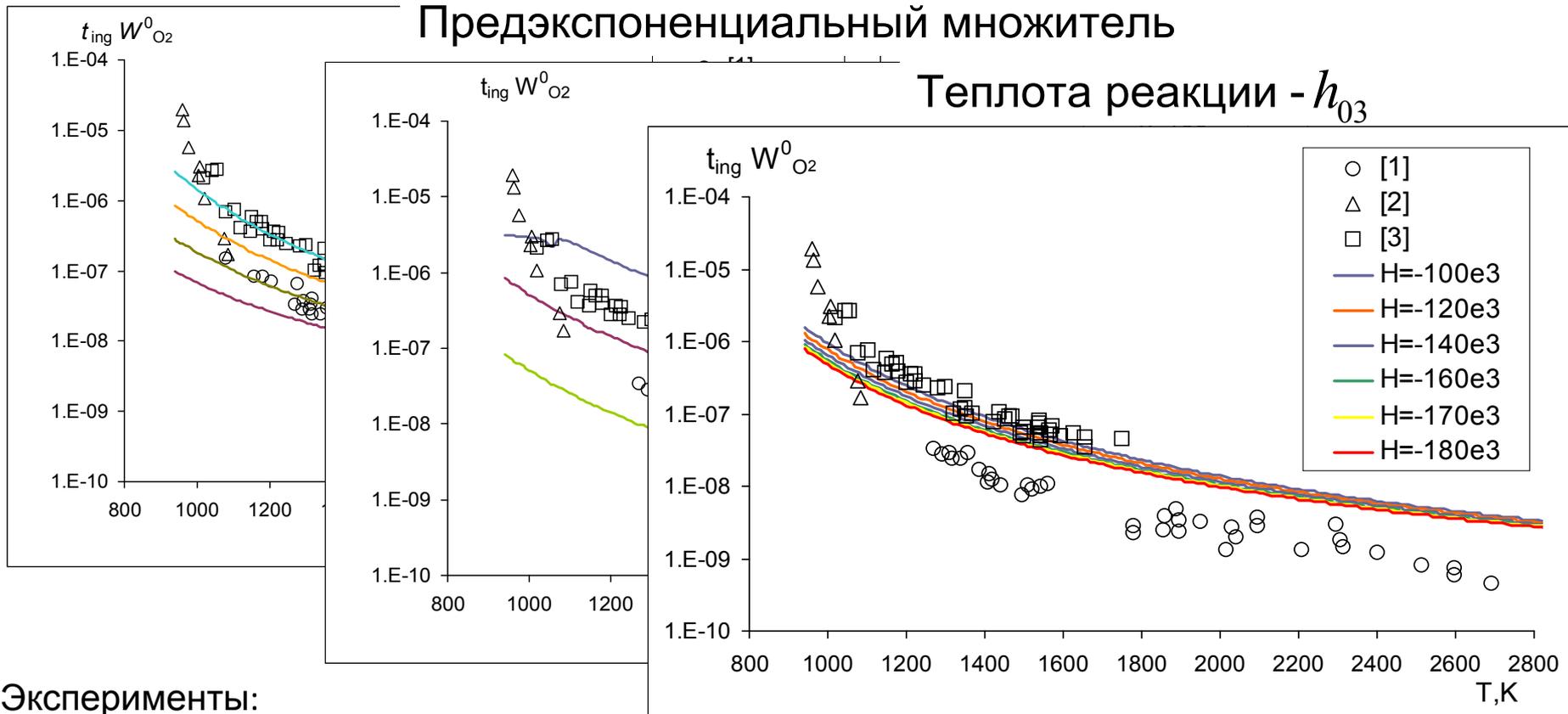
$$k_f = kT^w e^{-\frac{E}{RT}}$$

Верификация по времени задержки воспламенения. Параметрический анализ влияния констант модели (смесь $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + x \text{Ar}$)

Энергия активация

Предэкспоненциальный множитель

Теплота реакции - h_{03}

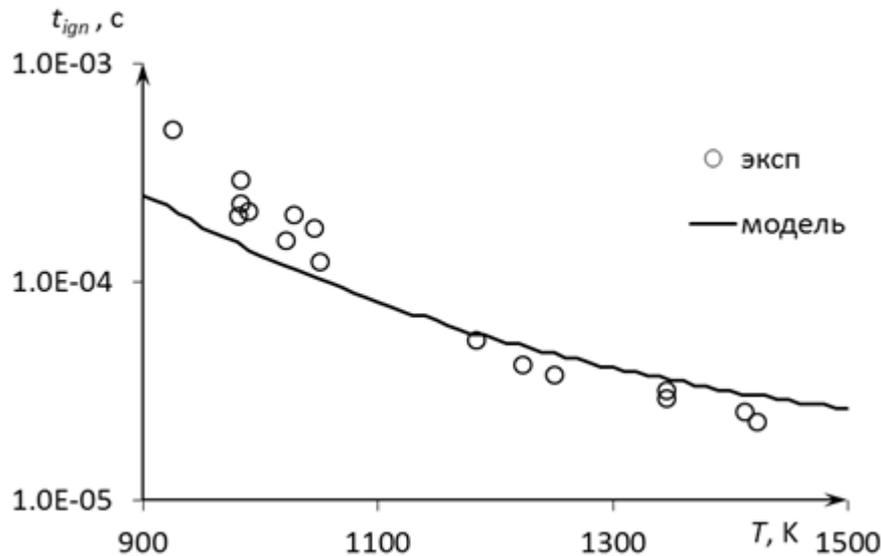


Эксперименты:

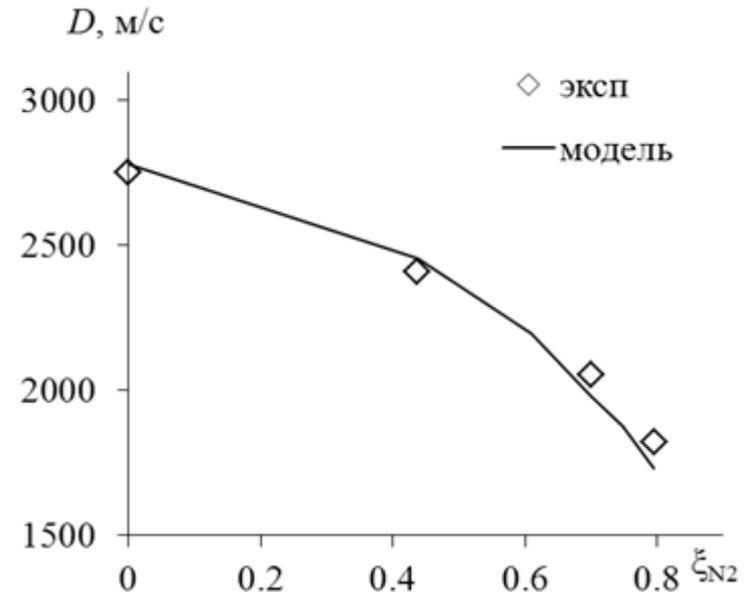
1. Skinner G.B., Ringrose G.H. Ignition delays of a hydrogen-oxygen-argon mixture at relatively low temperatures // J. Chem Phys. N 42, 1965, pp 2190–2204.
2. Schott G.L., Kinsey J.L. Kinetic Studies of Hydroxyl Radicals in Shock Waves. II. Induction Times in the Hydrogen-Oxygen Reactions. // J. Chem Phys. N 29, 1958, pp 1177–1188.
3. Hidaka Y., Sato K., Henmi Y., Tanaka H., Inami K. Shock-tube and modeling study of methane pyrolysis and oxidation // 4 Comb. Flame, N 118, 1999, pp. 340–358.

Верификация (смесь H₂ + air)

Время задержки воспламенения



Скорость ДВ от разбавления азотом



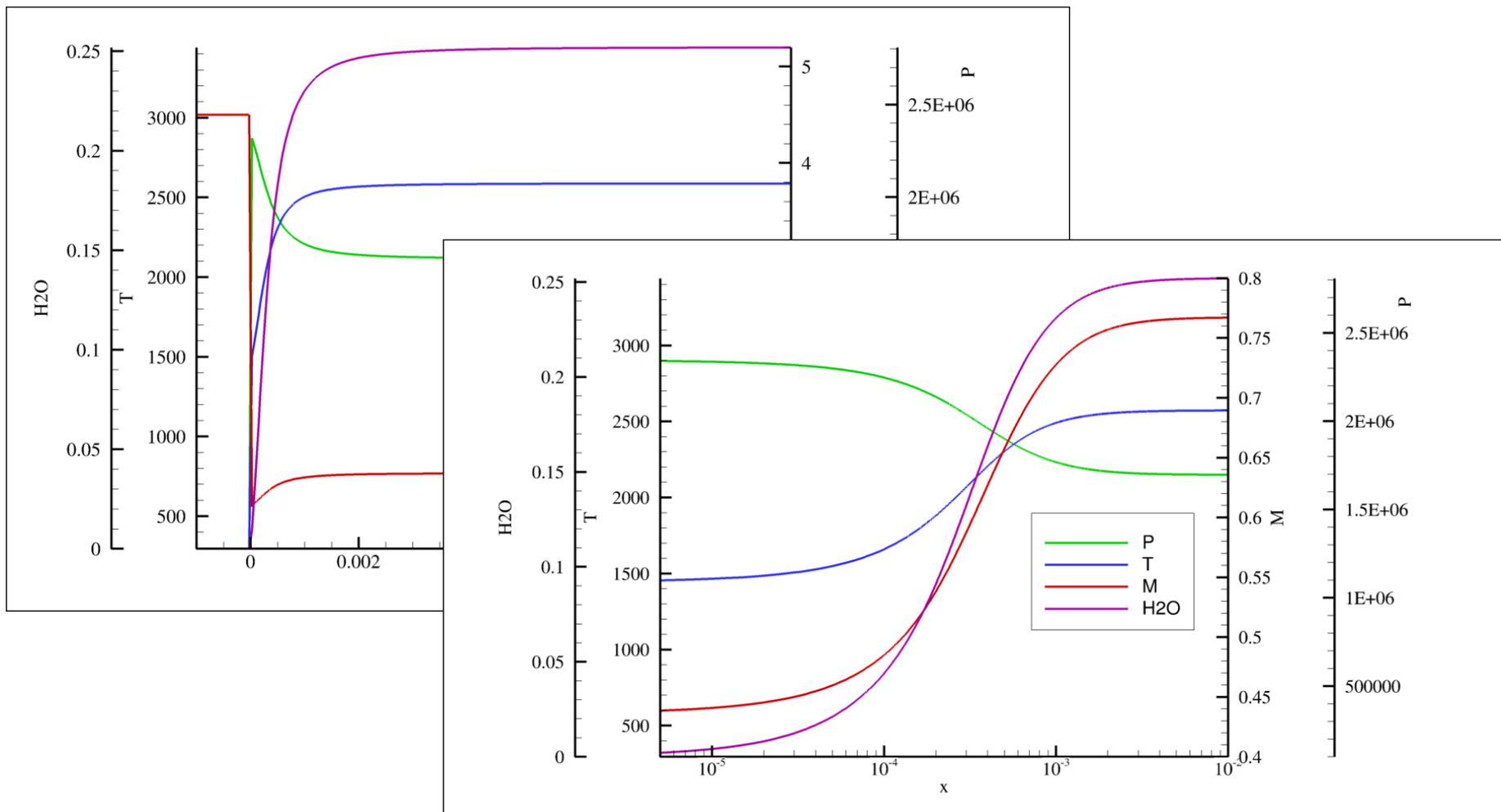
Константы, полученные в результате верификации схемы :

$$E = 7 \cdot 10^4 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}} \quad w = 0.8 \quad m = n = 0.7 \quad k = 1 \cdot 10^3 \quad Q = -170 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$$

Бедарев И.А., Федоров А.В., Рылова К.В. Применение детальных и приведенных кинетических схем для описания детонации водородовоздушных смесей с разбавителем // Физика горения и взрыва. 2015. Т. 51, № 5. С. 22-33.

Верификация (смесь $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{air}$) по размеру ячейки

Начальные данные – пересжатая детонационная волна



Детали математической модели и численного алгоритма для 2-D расчетов в ANSYS Fluent

Решатель:

- Нестационарный
- Density based

Математическая модель:

- Вязкий теплопроводный газ с учетом многокомпонентности смеси и химической кинетики

Численный метод:

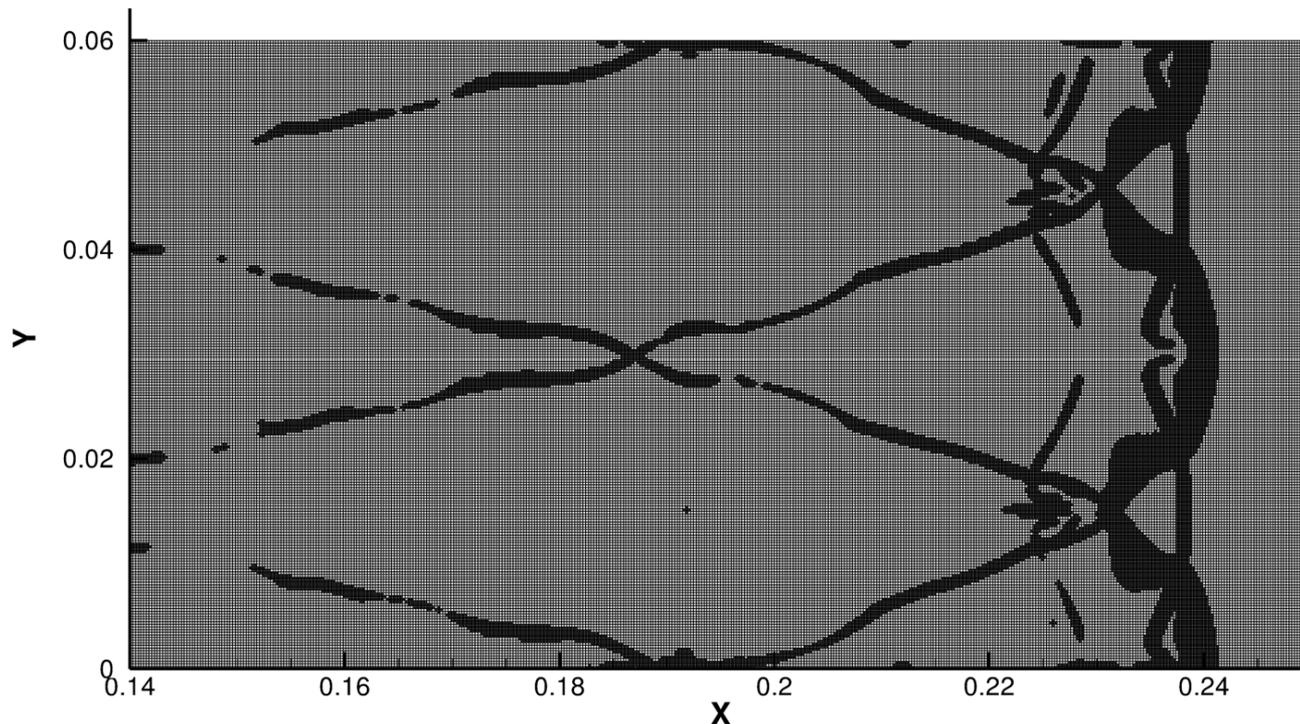
- Аппроксимация по времени – явная схема 4-го порядка типа Рунге-Кутты или неявная схема второго порядка
- Аппроксимация по пространству – противоточковая второго порядка
- Метод расщепления вектора потоков – AUSM

Расчетная сетка.

Динамическая адаптация сетки по градиенту плотности.

Шаги сетки в направлениях x и y :

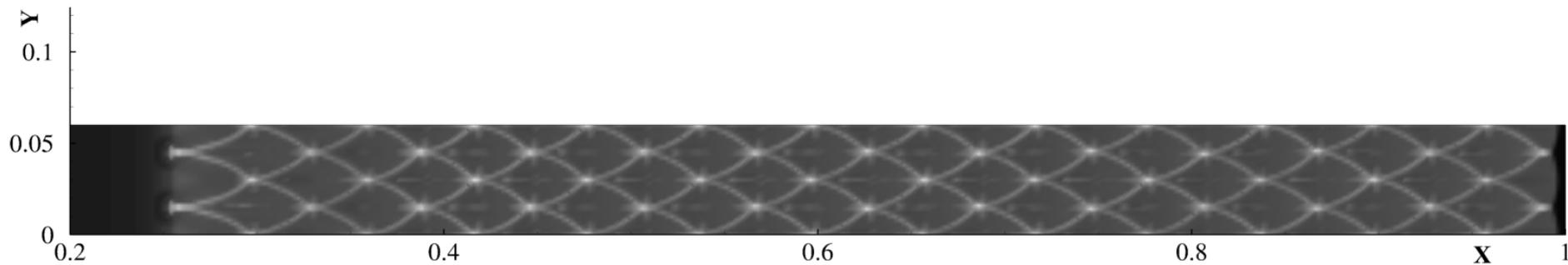
- без адаптации — **$1/10 \div 1/4$ мм**
- после адаптации (в зонах высокого градиента) — **$1/40 \div 1/16$ мм**



Фрагмент расчетной сетки

Верификация (смесь $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 77\% \text{Ar}$) по размеру ячейки

Поле максимумов плотности во времени (траектории
тройных точек)

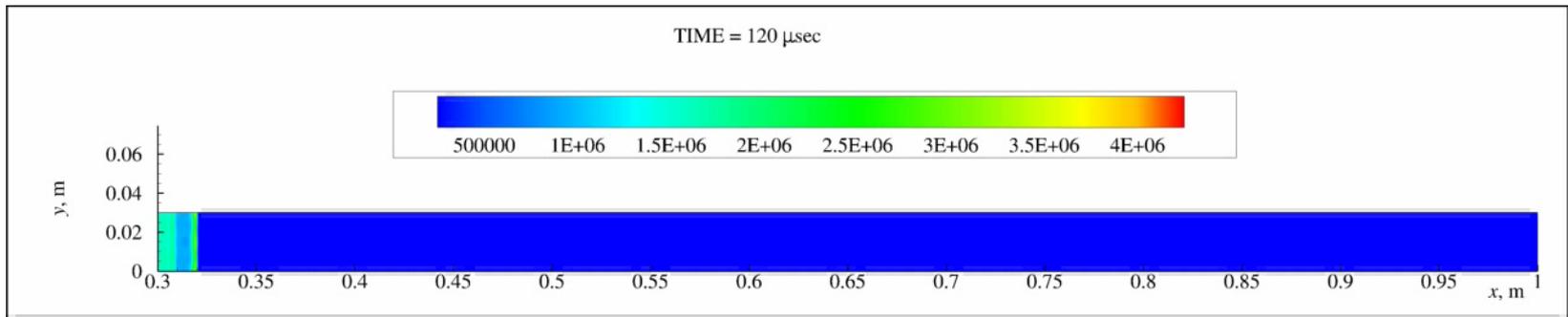


Расчетный размер ячейки ~ 30 мм

Эксперимент ~ 26 мм [данные R.A. Strehlow et al. 1967]

Верификация (смесь $\text{H}_2 + \text{air}$) по размеру ячейки

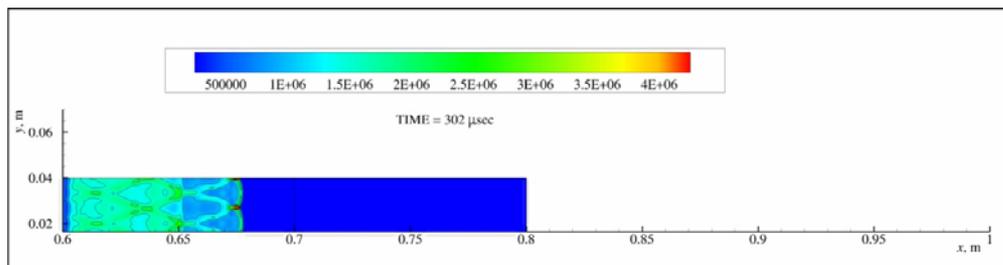
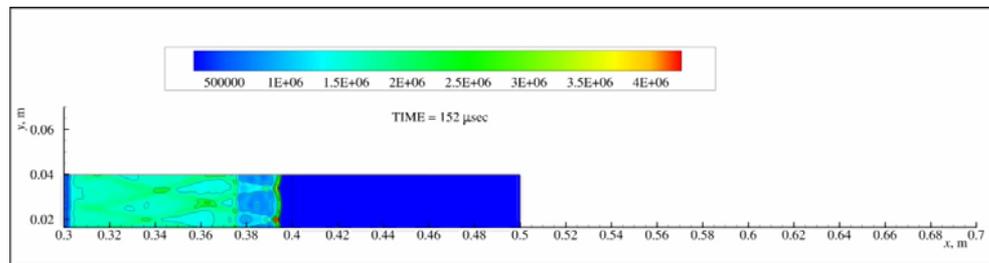
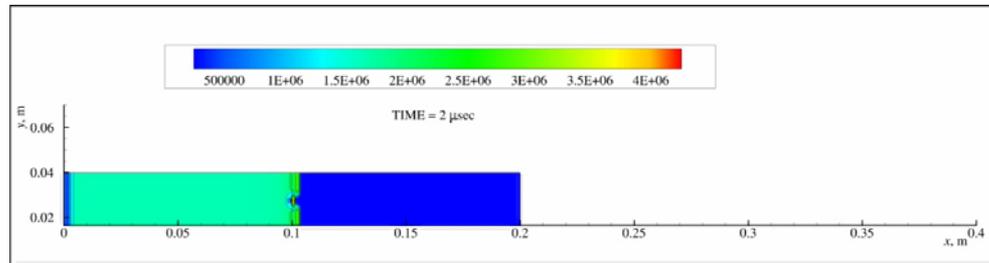
$$K = 10^3 \quad h = 30 \text{ мм}$$



Расчетный размер ячейки $> 15 \text{ мм}$
Эксперимент $\sim 10 \div 15 \text{ мм}$

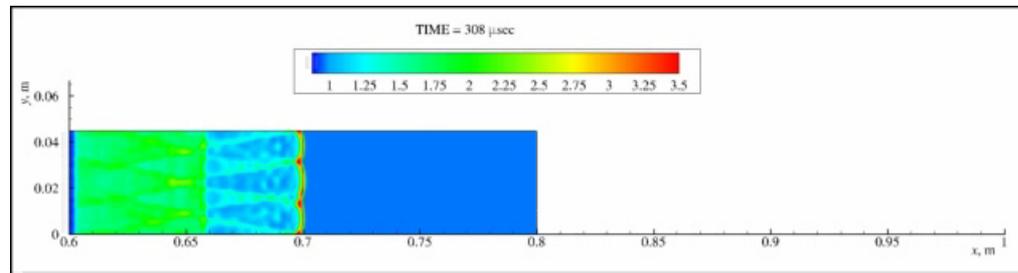
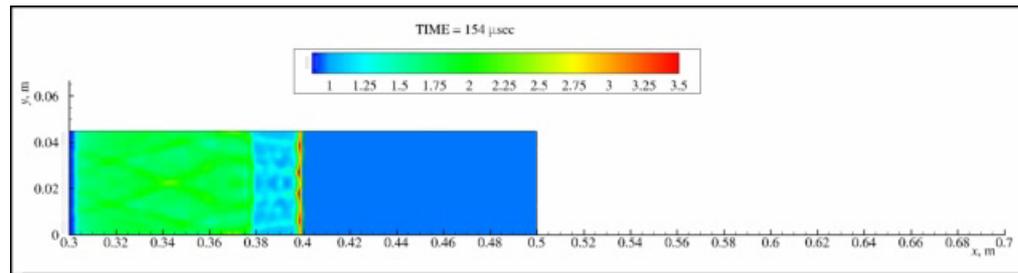
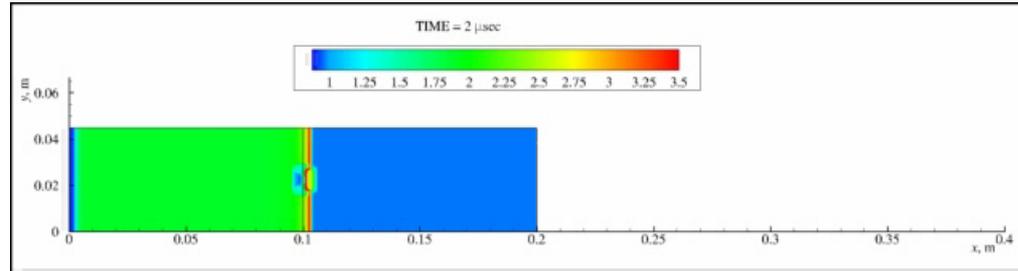
Верификация (смесь $\text{H}_2 + \text{air}$) по размеру ячейки

$$K = 1.5 \cdot 10^3 \quad h = 40 \text{ мм}$$



Верификация (смесь $H_2 + air$) по размеру ячейки

$$K = 1.5 \cdot 10^3 \quad h = 45 \text{ мм}$$



Скорость ДВ $\sim 1950 \text{ м/с}$

Подавление ячеистой детонации неподвижными инертными частицами

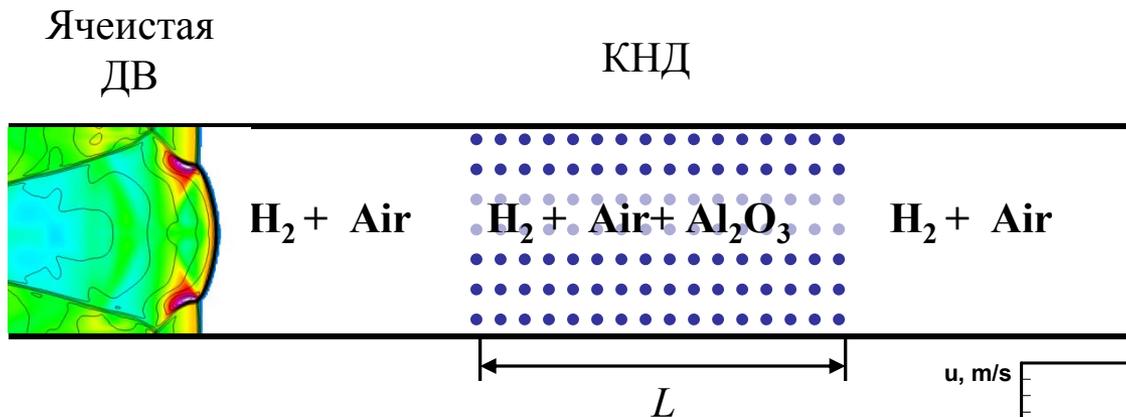


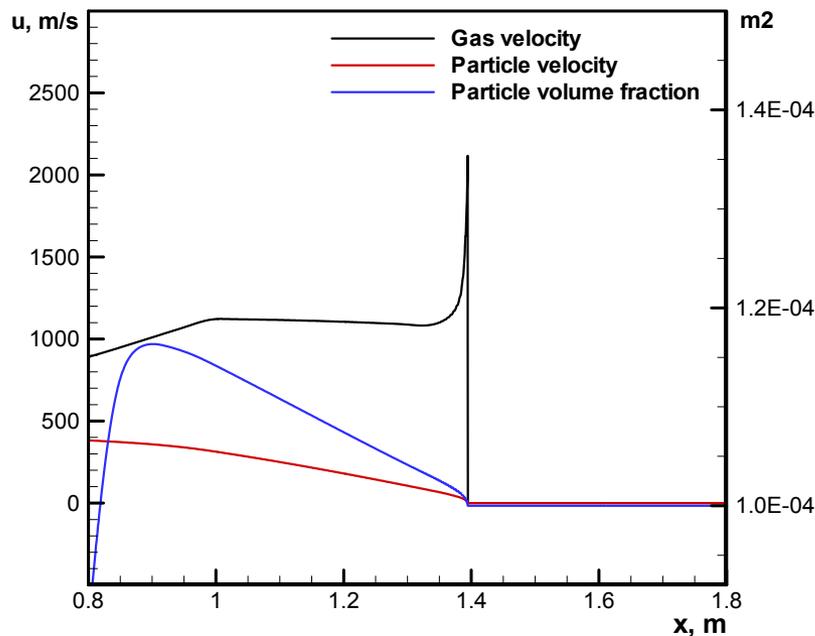
Схема течения

Приведенная кинетика
 $d = 100 \mu m$

Расчет: Тропин Д.А.
 Федоров А.В.

$$m_{2,0} = 10^{-4} \quad t = 5 \cdot 10^{-4} \text{ c}$$

$$u_1 = 2100 \text{ м/с} \quad u_2 \approx 100 \text{ м/с}$$



Сравнение распределения скоростей газа и частиц в ДВ

Математическая модель взаимодействия с частицами

Модель 1 – Дарси-Форхгеймера

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\alpha\mu u - \beta\rho u\sqrt{u^2 + v^2} \\ -\alpha\mu v - \beta\rho v\sqrt{u^2 + v^2} \\ q + (\alpha\mu u + \beta\rho u\sqrt{u^2 + v^2})u + (\alpha\mu v + \beta\rho v\sqrt{u^2 + v^2})v \end{pmatrix}$$

Модель 2 – неподвижные сферы

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ f_u \\ f_v \\ q - f_u \cdot u - f_v \cdot v \end{pmatrix}$$

$$f_u = -\frac{3m_2\rho}{4m_1d} C_D u \cdot \sqrt{u^2 + v^2}$$

$$f_v = -\frac{3m_2\rho}{4m_1d} C_D v \cdot \sqrt{u^2 + v^2}$$

$$q = \frac{6m_2\lambda_1}{d^2} \text{Nu} (T_p - T)$$

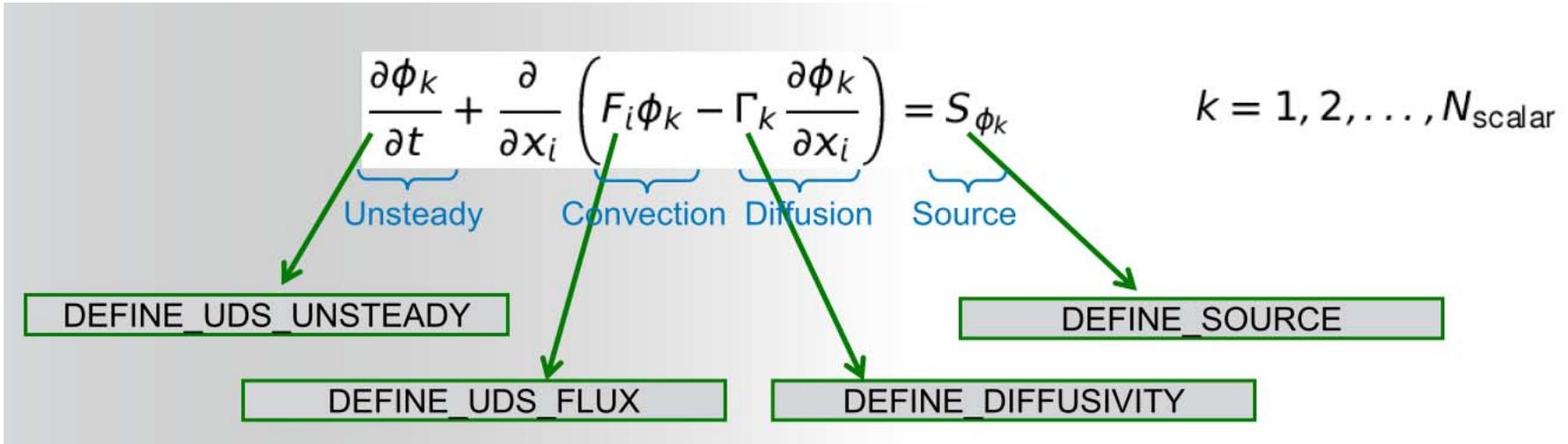
m_1 –

ПОРИСТОСТЬ
 $m_1 + m_2 = 1$

$$C_D = \left[1 + e^{-\frac{0.43}{M_{12}^{4.67}}} \right] \left[0.38 + \frac{24}{\text{Re}} + \frac{4}{\sqrt{\text{Re}}} \right], \quad \text{Nu} = 2 + 0.6\text{Re}^{1/2} \text{Pr}^{1/3}$$

Математическая модель

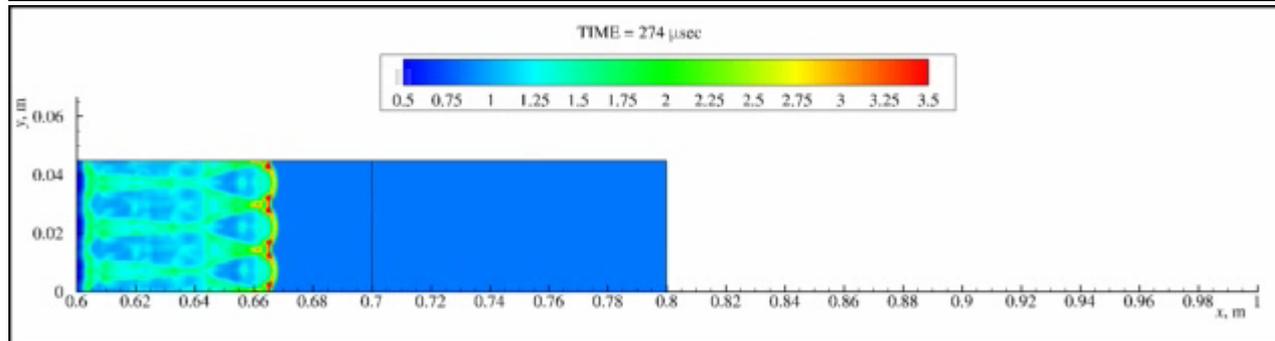
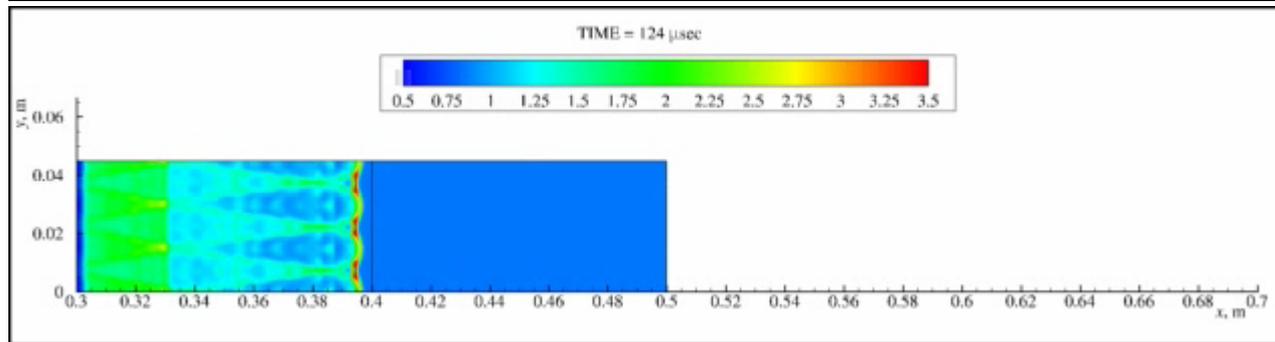
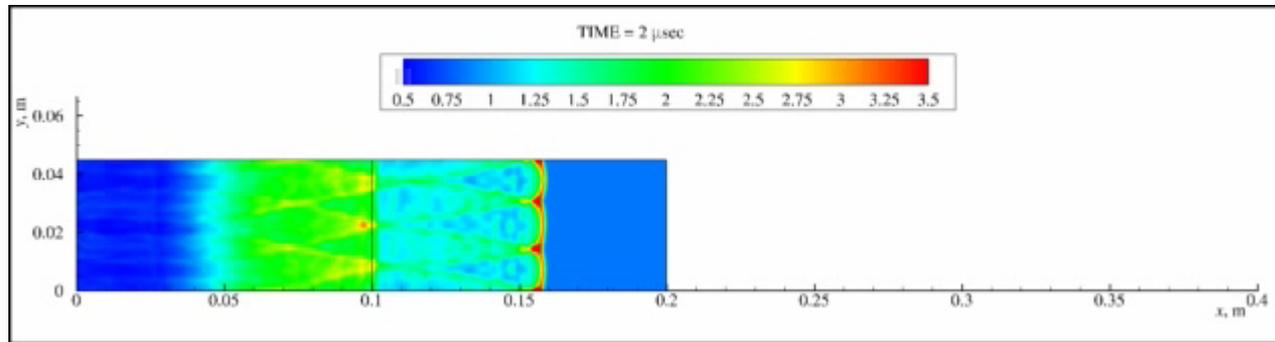
User-Defined Scalar (UDS) Transport Equation



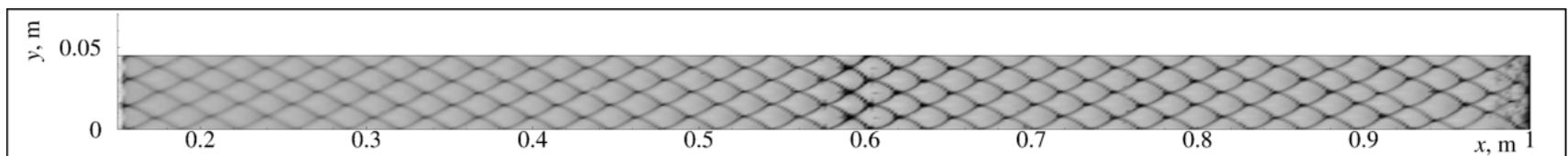
Температура неподвижных частиц

$$\frac{d\rho_2 e_2}{dt} = -q + f_u \cdot u + f_v \cdot v, \quad T_p = \frac{e_2}{c_{p2}}$$

Подавление детонации инертными частицами



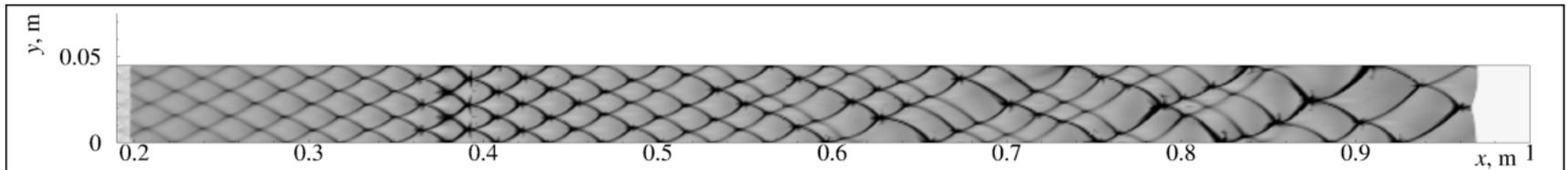
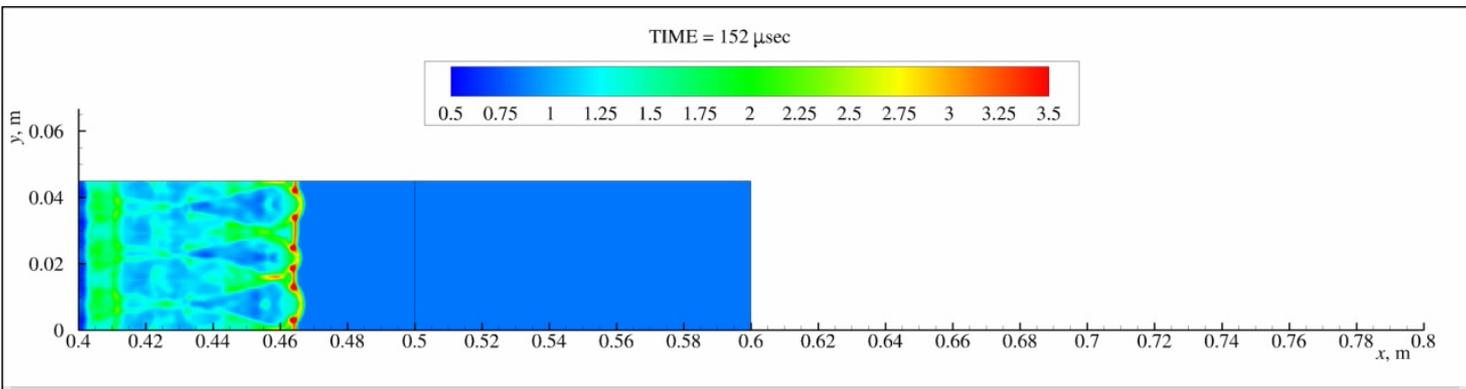
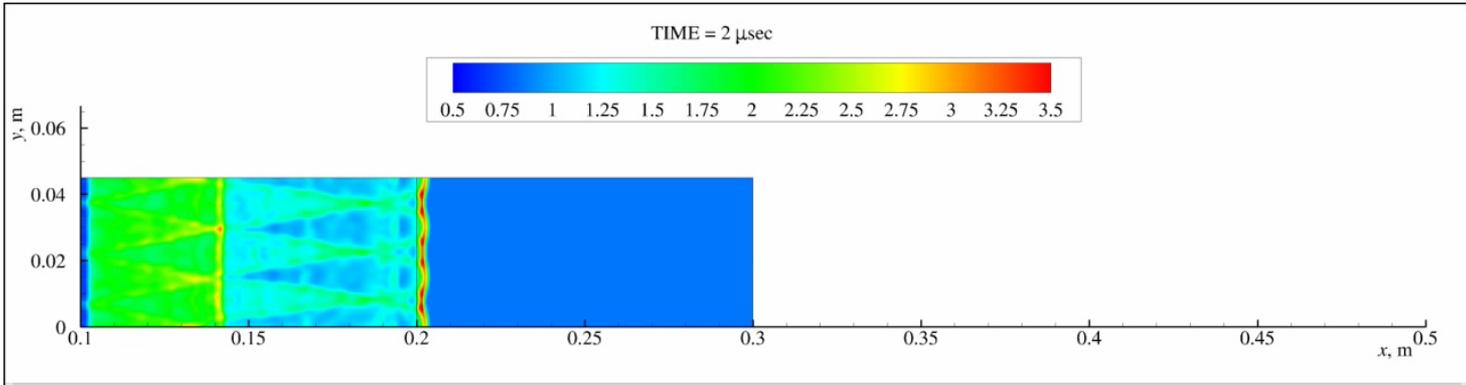
$$m_2 = 10^{-4}$$



Размер детонационной ячейки меняется слабо. Скорость ДВ ~ 1810 м/с

Подавление детонации инертными частицами

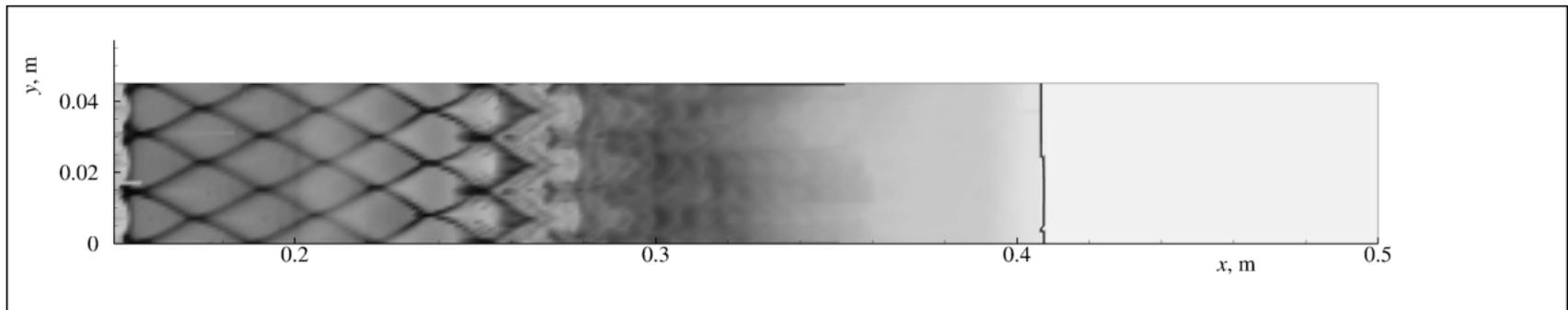
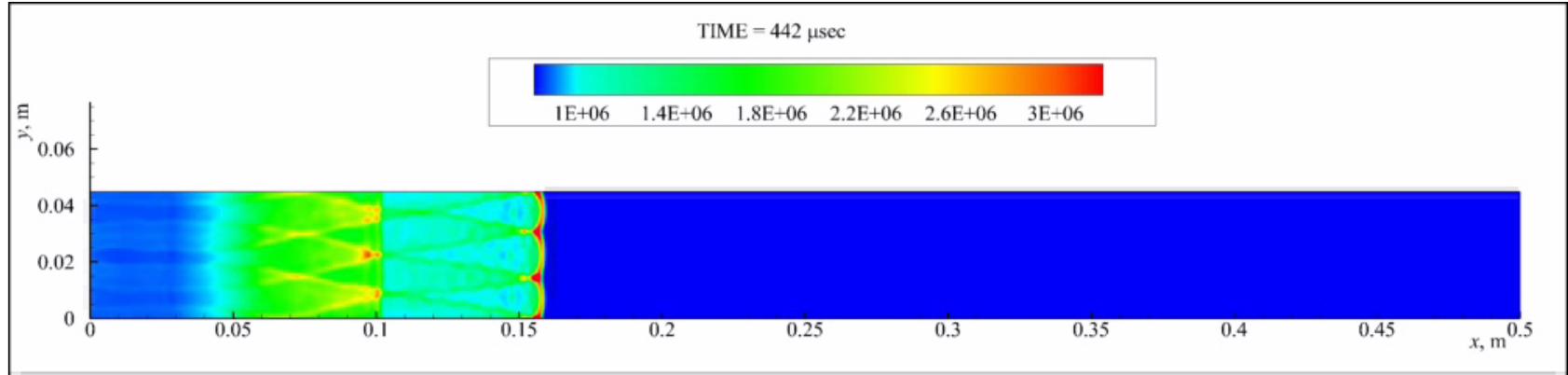
$$m_2 = 10^{-3}$$



Нерегулярная ячейка. Скорость ДВ ~ 1730 м/с

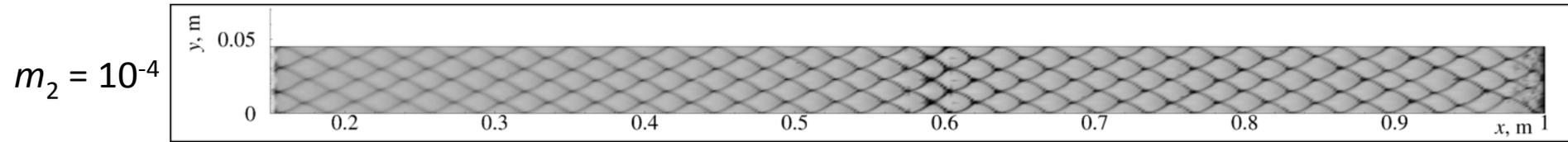
Подавление детонации инертными частицами

$$m_2 = 10^{-2}$$



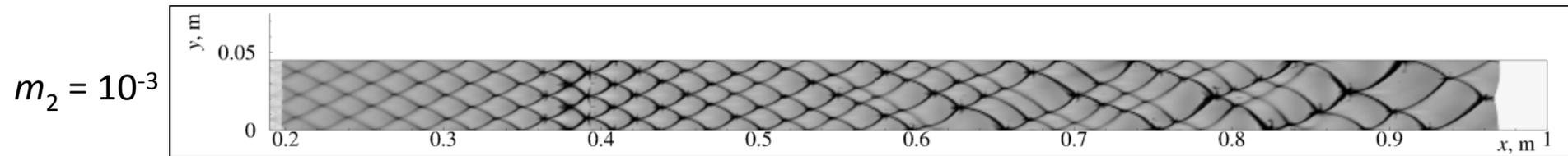
Срыв детонации. Вырождение в ударную волну.

Подавление детонации инертными частицами

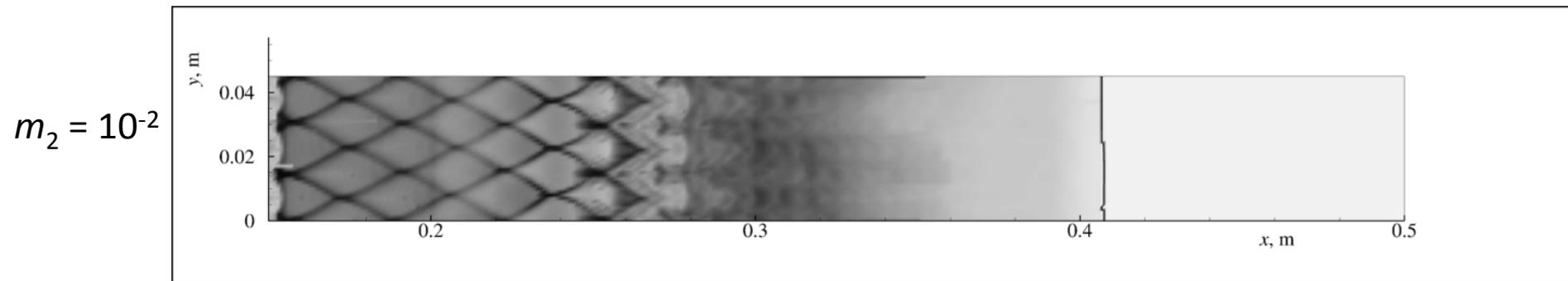


Размер детонационной ячейки меняется слабо. Скорость ДВ ~ 1810 м/с.

$$\text{Дефицит скорости } \eta = \frac{D}{D_{CJ}} = 0.93$$



Нерегулярная ячейка. Скорость ДВ ~ 1730 м/с, $\eta = 0.89$



Срыв детонации. Вырождение в ударную волну.

Выводы:

- Разработана и верифицирована по времени задержки воспламенения, скорости ДВ и размеру детонационной ячейки простейшая модель приведенной кинетики для описания детонации водорода в воздухе.
- В рамках пакета ANSYS Fluent создана технология расчетов двумерных детонационных течений в системе реагирующая газовая смесь – инертные частицы для анализа вопросов связанных с подавлением ячеистой детонации.
- Получены значения объемной концентрации, приводящие к изменению размеров детонационной ячейки, ослаблению детонационной волны и срыву детонации

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!

Фрагмент UDF DEFINE_SOURCE для задания закона сопротивления

```
#include "udf.h"
#define m2 0.01
#define d 0.0001
real s1, s2, s3;
DEFINE_SOURCE(xmom_src,c,t,dS,eqn)
{
    real source, mu, u, v, w, ro, re, cp, rg, a, tg, mach, cd, m1;
    mu = C_MU_L(c,t);
    u = C_U(c,t);
    v = C_V(c,t);
    w = sqrt(u*u+v*v);
    ro = C_R(c,t);
    tg = C_T(c,t);
    cp = C_CP(c,t);
    rg = C_RGAS(c,t);
    re = ro * w * d / mu;
    if ( re < 0.1 ) re = 0.1;
    a = sqrt(cp/(cp/rg-1)*tg);
    mach = w/a;
    cd = (1. + exp(-0.43/pow(mach,4.67))) * (0.38+24.0/re+4.0/sqrt(re));
    m1 = 1. - m2;
    source = -(3.0*m2*ro/m1/4.0/d*cd*u*w);
    dS[eqn] = -(3.0*m2*ro/m1/4.0/d*cd*w);
    s1 = source;
    return s1; }
}
```