



VNIITF
ROSATOM

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИОННЫХ НЕУСТОЙЧИВОСТЕЙ В ВОДОРОД-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЯХ

Беляев П.Е., Макеева И.Р., Мастюк Д.А., Пигасов Е.Е., Куприянец Т.А.

Содержание

1. Введение

Краткий обзор контекста

2. Модель сплошной среды

Моделирование транспортных и
газодинамических процессов

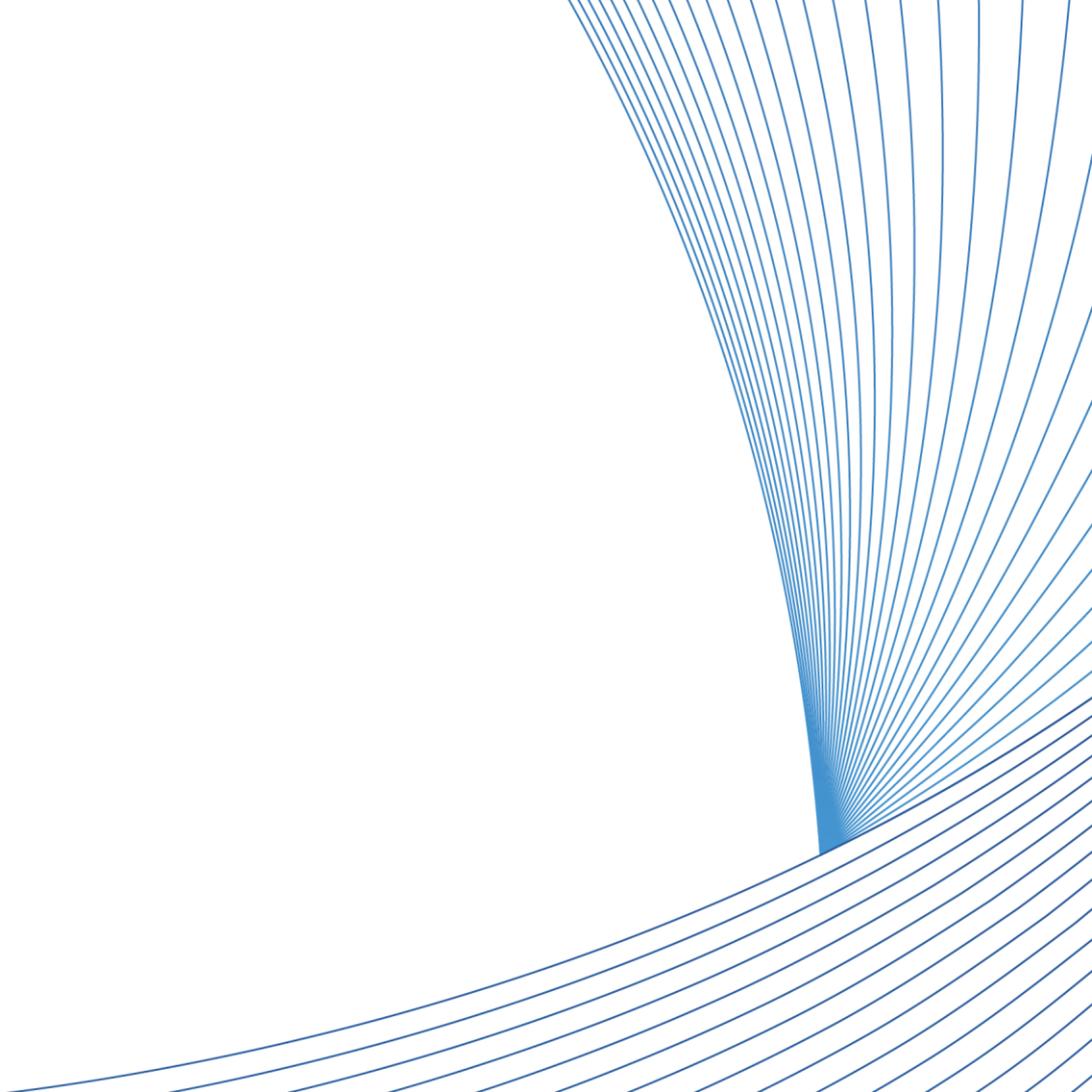
3. Результаты расчётов

Представление результатов тестовых
расчётов

4. Заключение

1

Введение



Введение и мотивация

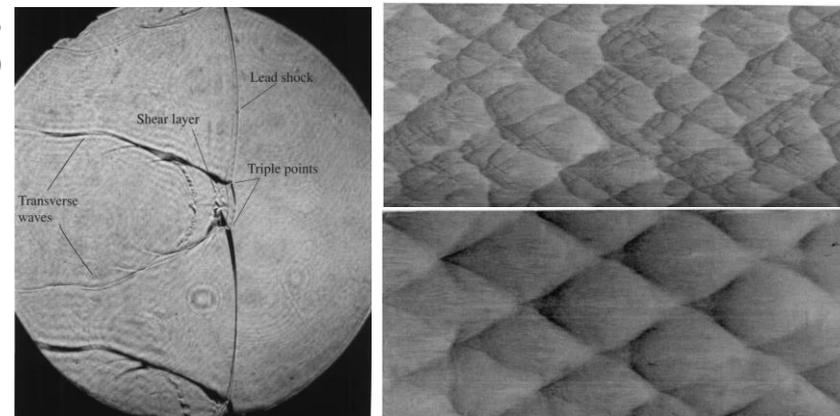
- В производственном процессе водород-содержащих веществ задействованы большие объёмы различных горючих газов, в том числе водорода.
- Частота аварии на НПЗ - 10^{-1} год.
- За 10 лет в России – 65 пожаров, 46 «взрывов», 15 выбросов [1].
- Размеры детонационной ячейки – ключевая характеристика детонационной способности смеси.
- Экспериментальное исследование детонационной способности ограничено масштабами экспериментальных установок [2].



1. Краснов А.В. Статистика чрезвычайных происшествий на объектах нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности за 2007-2016 гг. «Нефтегазовое дело» 2016 - № 6.
2. Tieszen S.R., et al. Gaseous hydrocarbonair detonations // Combustion and Flame. – 1991. – V. 84(3). – P. 376-390

Моделирование детонационных неустойчивостей

- Загромождённость и наличие газозвесей в области горения могут привести к ускорению [1,2]
- Численное исследование характеристик неустойчивостей детонационного фронта может снять ограничения натурального эксперимента.
- Характеристики моделируемых неустойчивостей детонационного фронта существенно зависят от выбора кинетического механизма [3].



Шлирен-съёмка фронта детонационной волны и примеры следов на покрытой сажей пластине [4]

1. Wagner H. Gg. Flammenbeschleunigung – zentrales problem bei der Entscheidung von explosionen // PTB-Mitteilungen. 1981. V. 91, № 4. P. 24
2. Sherman M.P., Tieszen S.R., Benedick W.D., Fisle J.W. The effect of traverse venting of flame acceleration and transition to detonation in a large channel // Progress in Astronautics and Aeronautics. Dynamics of explosions. AIAA Inc., N.-Y. 1986. V. 106. P. 66
3. Борисов С.П., и др., Сравнение детальных кинетических моделей детонации // Физика горения и взрыва. – 2021 – Т. 57, № 3. – С. 18-34
4. Austin M. PhD Thesis: The Role of Instability in Gaseous Detonation

2.

Методология моделирования химически реагирующей сплошной среды

Система уравнений законов сохранения

Уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho Y_i dV = - \oint_{\partial V} \rho Y_i \vec{U} d\vec{f} + \oint_{\partial V} \vec{J}_i d\vec{f} + \int_V S_{Y_i} dV$$

Уравнение сохранения импульса:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \vec{U} dV = - \oint_{\partial V} (\rho \vec{U} \vec{U} - K) d\vec{f} + \int_V \left[\rho \vec{g} + \begin{pmatrix} 0 \\ P \end{pmatrix} \right] dV + \int_V \vec{S}_J dV$$

Уравнение сохранения энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \varepsilon dV = - \oint_{\partial V} \rho \vec{U} \varepsilon d\vec{f} + \oint_{\partial V} K \vec{U} d\vec{f} + \oint_{\partial V} \vec{J}_q d\vec{f} + \int_V \rho (\vec{g} \cdot \vec{U}) dV + \int_V S_\varepsilon dV$$

Вязкий тензор напряжений:

$$K = \begin{pmatrix} -P + 2\eta \frac{\partial U_z}{\partial z} - \left(\eta_b - \frac{2}{3} \eta \right) \operatorname{div} \vec{U} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_r}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial r} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_r}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial r} \right) & -P + 2\eta \frac{\partial U_r}{\partial r} - \left(\eta_b - \frac{2}{3} \eta \right) \cdot \operatorname{div} \vec{U} \end{pmatrix}$$

ρ – плотность,
 r, z – координатные компоненты вектора скорости U , вдоль радиуса и оси симметрии соответственно,
 \vec{U} – вектор скорости,
 P – давление,
 E – внутренняя энергия,
 S_{Y_i} – источник массы i -го компонента смеси,
 S_j – источник импульса,

S_ε – источник энергии,
 V – объём,
 δ_{im} – символ Кронекера,
 $d\vec{f}$ – ориентированная площадь,
 η – коэффициент кинематической вязкости,
 J_q – поток энергии за счёт теплопроводности,
 ε – полная энергия единицы массы.

Моделирование многокомпонентной среды

Уравнение состояния

$$P = P(\rho, E)$$

Плотность диффузионного и теплового потоков

$$\vec{J}_i = -D_{im}\vec{V}_i \quad \vec{J}_q = \lambda_{cm}\nabla T$$

Коэффициент диффузии относительно смеси [1]

$$D_{km} = \frac{\sum_{k \neq j}^N X_j W_j}{\bar{W} \sum_{k \neq j}^N X_j / D_{jk}}$$

Коэффициент теплопроводности смеси рассчитывается по формуле Варнатца [2]

$$\lambda_{cm} = \sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i}{1 + 1.065 \sum_{k=1, k \neq i}^N \frac{x_k}{x_i} \Phi_{ik}} \quad \text{где } \Phi_{ik} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_k} \right)^{-\frac{1}{2}} \left[1 + \sqrt{\frac{\eta_i}{\eta_k} \sqrt{\frac{M_k}{M_i}}} \right]$$

i, j – индекс компонента смеси,

Y_i – массовая доля i -го компонента смеси,

S_{Y_i} – источник массовой доли i -го компонента смеси,

ρ – плотность,

\vec{J}_i – плотность диффузионного потока i -го компонента смеси,

N – количество компонент смеси.

1. R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lightfoot, Transport Phenomena, John Wiley and Sons, New York, 1960.

2. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ : пер. с англ. / Ю. Варнатц, У. Маас, Р. Дибл. - М. : Физматлит, 2003. - 352 с.

Вычисление базовых коэффициентов переноса

Бинарный коэффициент диффузии

$$D_{12} = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{2\pi k^3} \frac{T^3}{m_{12}}}{\rho \pi \sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{(1,1)*}}$$

Коэффициент вязкости

$$\eta_1 = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi k m T}}{\pi \sigma^2 \Omega^{(2,2)*}}$$

Коэффициент теплопроводности в чистом одноатомном газе

$$\lambda_1 = \frac{25}{32} \frac{\sqrt{\pi k m T}}{\pi \sigma^2 \Omega^{(2,2)*}} C_v$$

i, j – индекс компонента смеси,
 Y_i – массовая доля i -го компонента смеси,
 ρ – плотность,
 $\Omega_{12}^{(1,1)*}$ – интеграл столкновений

\bar{J}_i – плотность диффузионного потока i -го компонента смеси,
 N – количество компонент смеси.

1. Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс и Р. Бедр Молекулярная теория газов и жидкостей. Издательство иностранной литературы. Москва 1961 г.
2. F. Moukalled, L. Mangani, M. Darwish, "The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics".
3. Беляев П.Е., Макеева И.Р., Пигасов Е.Е., Мастюк Д.А. Адаптация метода Куропатенко для расчета ударных волн в эйлеровых координатах // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование» (Вестник ЮУрГУ ММП). – 2021. – Т. 14, № 1. – С. 83–96

Моделирование реагирующей среды

Скорость реакции определяется по закону Аррениуса и закону действующих масс:

$$W_j = z_j T^{b_j} \exp\left(-\frac{E_{\text{акт}j}}{RT}\right) \prod_{i=1}^{n_c} C_i^{v_{i,j}},$$

Изменение концентрации реагентов и температуры:

$$\frac{dC_k}{dt} = \sum_{j=1}^{n_r} W_j (v'_{k,j} - v_{k,j}), \quad k = 1 \dots n_c,$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{-\sum_{k=1}^{n_c} [h_k(T) \frac{dC_k}{dt}]}{\sum_{k=1}^{n_c} [C_k c_{Pk}(T)]}.$$

Скорость образования массы и источник энергии за счёт химических реакций:

$$\omega_k = M_k \frac{dC_k}{dt},$$

$$S_{\text{хим}} = \rho_{\text{см}} c_{V\text{см}} \frac{dT}{dt}$$

Реконструкция значений на границах

В данной работе для реконструкции значений на границах используются ограничители наклона производных [1] и WENO5[2]:

$$u_{i+1/2}^n = u_i + \frac{1}{2} \Delta x_{i+1/2} \Psi(r_{i+1/2}) \frac{u_i - u_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$$

$$r_{i+1/2} = \frac{u_{i+1} - u_i}{u_i - u_{i-1}} \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_i}$$

$$\Psi(r) = \max[0, \min(r, 1)]$$

Диссипация на разрыве [3]

$$w = \frac{(\gamma + 1)\Delta U}{4} \rho_d^n + \sqrt{\left(\frac{(\gamma + 1)\Delta U}{4} \rho_d^n\right)^2 + \gamma \rho_d^n P_d^n}$$

$$P_F^* = P_u + w\Delta U.$$

1. Waterson N.P., etc. Design principles for bounded higher-order convection schemes – a unified approach / Journal of Computational Physics 224 (2007) 182–207
2. C.-W. Shu, Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws, in Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations, Lecture Notes in Math. 1697, Springer-Verlag, Berlin, 1998, pp. 325–432
3. Беляев, П.Е. Адаптация метода Куропатенко для расчета ударных волн в эйлеровых координатах/ П.Е. Беляев, И.Р. Макеева, Е.Е. Пигасов, Д.А. Мاستюк // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. 2021. Т. 14. № 1. – С. 83 — 96.

3.

Результаты расчётов

Тестовые расчёты

1. Тестирование химического решателя

Сравнение с экспериментальными данными по задержке воспламенения

2. Задача Лакса-Лиски

Тестирование решения 2D задачи Римана

3. Моделирование детонационных неустойчивостей

Сравнение результатов расчёта с экспериментальными данными

Тестирование химического решателя. Постановка

Автор	Состав	φ	P, атм	T, K
J. Herzler, C. Naumann / Proceedings of the Combustion Institute 32 (2009) 213–220	H ₂ -O ₂ -Ar	0,1	1, 4, 16	850-2200
	H ₂ -O ₂ -N ₂	0,5	1, 4, 16	850-2200
Skinner GB, Ringrose GH (1965). J Chem Phys, 42:2190-2192.	H ₂ -O ₂ -Ar	2	5	900-1100
Petersen EL, (1996). 20th Int. Symp on Shock Waves, 941-946.	H ₂ -O ₂ -Ar	1	33, 64, 87	1100-1900

Таблица 1. Экспериментальные данные

Тестирование химического решателя. Результаты 1

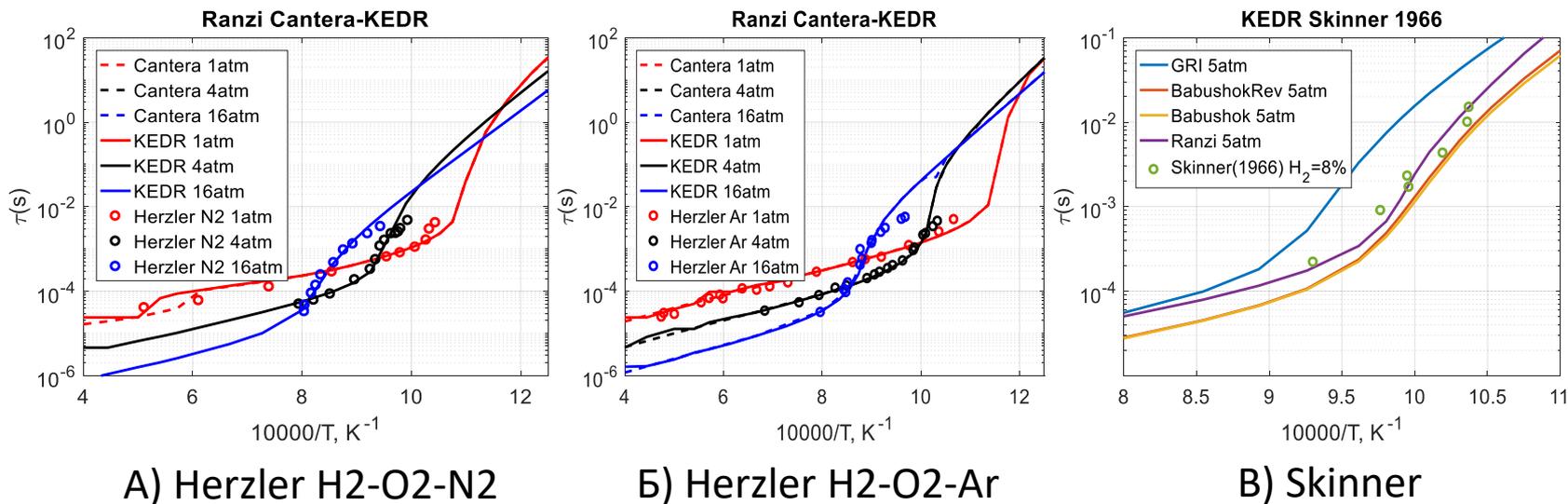


Рисунок 1. Измеренные в [1,2] и рассчитанные задержки воспламенения для смесей водород-кислород-азот и водород-кислород-аргон

1. J. Herzler, C. Naumann / Proceedings of the Combustion Institute 32 (2009) 213–220
2. Skinner GB, Ringrose GH (1965). J Chem Phys, 42:2190-2192.

Тестирование химического решателя. Результаты 2

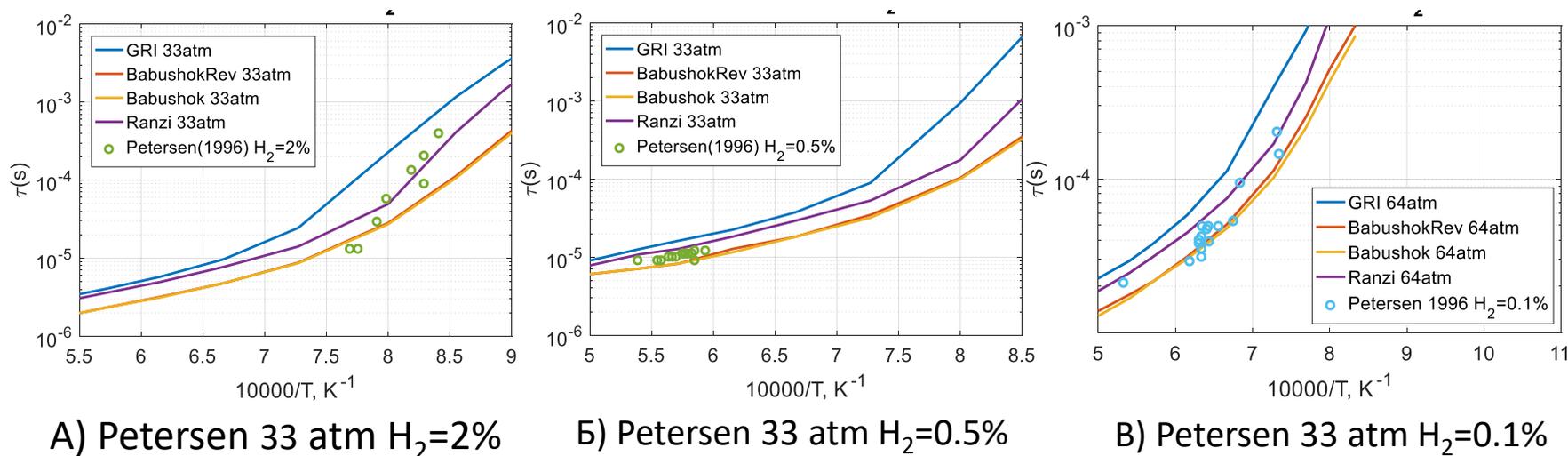


Рисунок 2. Измеренные в [1] и рассчитанные задержки воспламенения для смесей водород-кислород-аргон

Тестирование химического решателя. Результаты 3

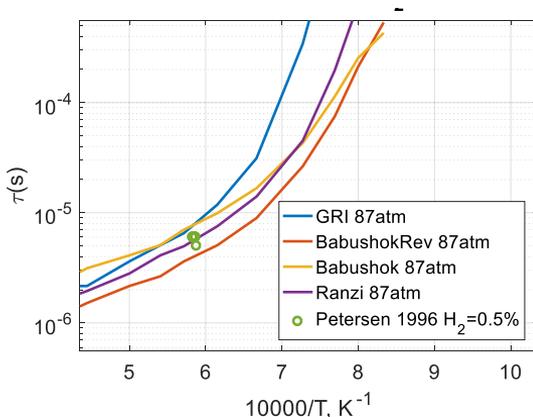


Рисунок 3. Измеренные в [1] и рассчитанные периоды индукции для смеси водород-кислород-аргон при давлении 87 атмосфер

1. Petersen EL, (1996). 20th Int. Symp on Shock Waves, 941-946.
2. Alan Kéromnès et al., An experimental and detailed chemical kinetic modeling study of hydrogen and syngas mixture oxidation at elevated pressures / Combustion and Flame - V 160 – 2013 – pp. 995-1011
3. Бабушок В.И., и др. Структура предела цепочно-теплового самовоспламенения. Кинетика и катализ. Т. XXV, вып. 1, 1984.
4. Smith, G. P., et al., GRI-Mech 3.0.

№	GRI, %	Ranzi, %	Bab, %	BabRev, %
1.1	35.046	20.972	30.008	25.410
1.2	1033.421	71.804	44.395	45.672
1.3	387.525	58.219	52.909	52.088
2.1	80.476	27.251	37.760	36.691
2.2	399.514	51.720	62.991	62.122
2.3	168.806	19.036	75.326	74.547
3	457.463	28.041	46.186	40.095
4.1	428.338	58.427	49.312	48.810
4.2	57.926	25.783	18.860	18.282
4.3	96.929	32.810	17.229	15.181
4.4	32.271	8.649	35.339	30.528
Min	32.271	8.649	17.229	15.181
Max	1033.421	71.804	75.326	74.547

Таблица 2. Среднее относительное отклонение рассчитанных задержек воспламенения от экспериментальных данных

$$E = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\tau_s - \tau_{\text{exp}}}{\tau_{\text{exp}}} \right|$$

Задача 2. Постановка

Размеры расчётной области: $l = 1 \times 1$

Начальные условия в области представлены в Таблице 1. Граничные условия – свободное протекание.

	Левый				Правый			
	Давление	Плотность	V_x	V_y	Давление	Плотность	V_x	V_y
Верхний	0,3	0,5323	1206	0	1,5	1,5	0	0
Нижний	0,029	0,138	1,206	1,206	0,3	0,5323	0	1,206

Таблица 3. Начальные условия

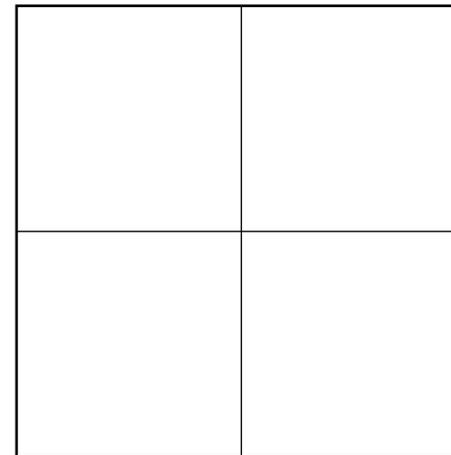
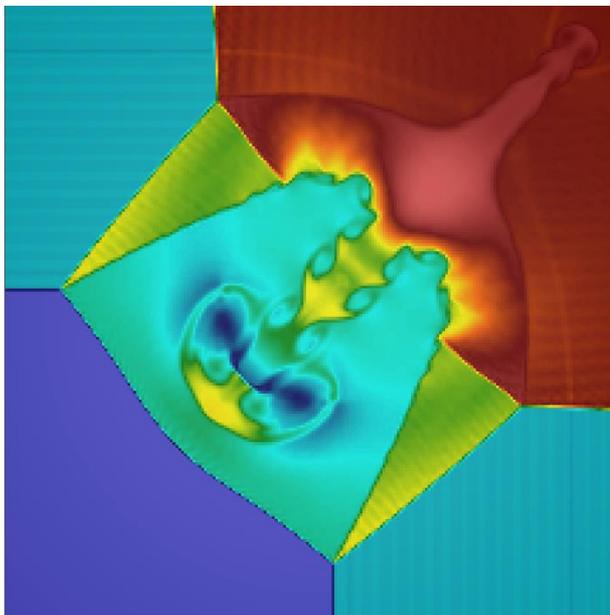
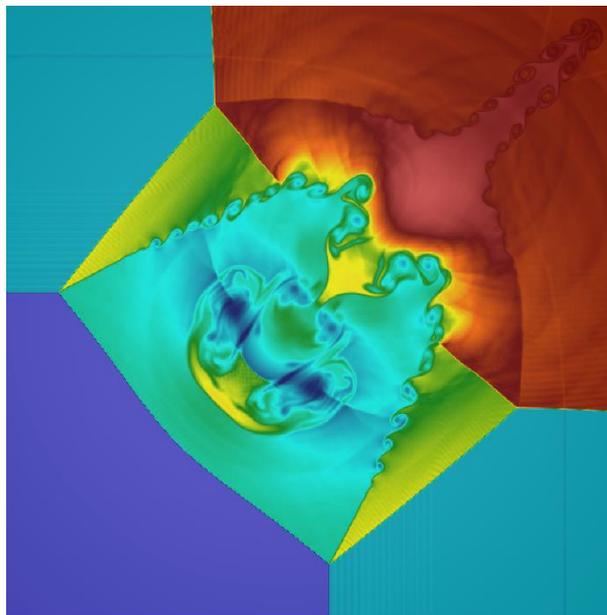


Рисунок 4. Схема расчётной области

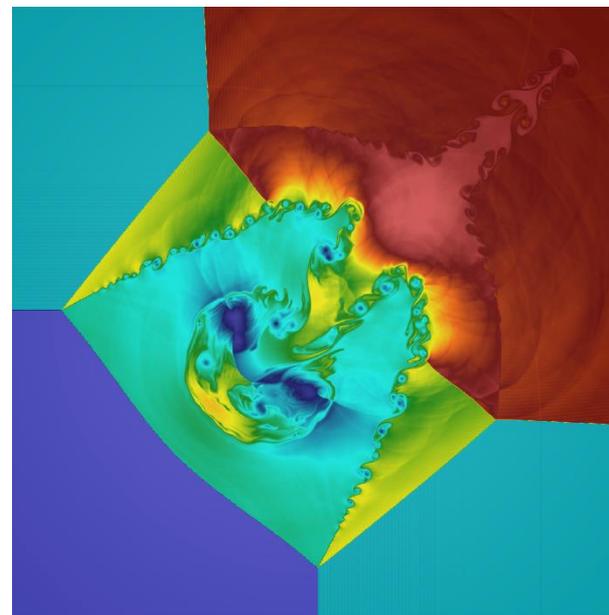
Задача 2. Результаты



А) 400x400 ячеек



Б) 1000x1000 ячеек



В) 1800x1800 ячеек

Рисунок 5. Поля плотности на момент времени $t=0.5$, представленные в разных сеточных разрешениях для WENO5

Моделирование детонационных неустойчивостей.

Постановка

Периодическое ГУ



Рисунок 6. Схема расчетной области

Размеры области $l = 0,2\text{м} \times 0,04\text{м}$

Начальные условия:

$$X_{\text{H}_2} = 0.29, X_{\text{O}_2} = 0.21(1 - X_{\text{H}_2}), X_{\text{N}_2} = 1 - (X_{\text{H}_2} + X_{\text{O}_2}), T_0 = 500^\circ\text{K}, P_0 = 10^5\text{Па}.$$

Горячая область:

$$P_1 = 4\text{МПа} \quad T_1 = 3000^\circ\text{K}$$

Моделирование детонационных неустойчивостей. Результаты 1

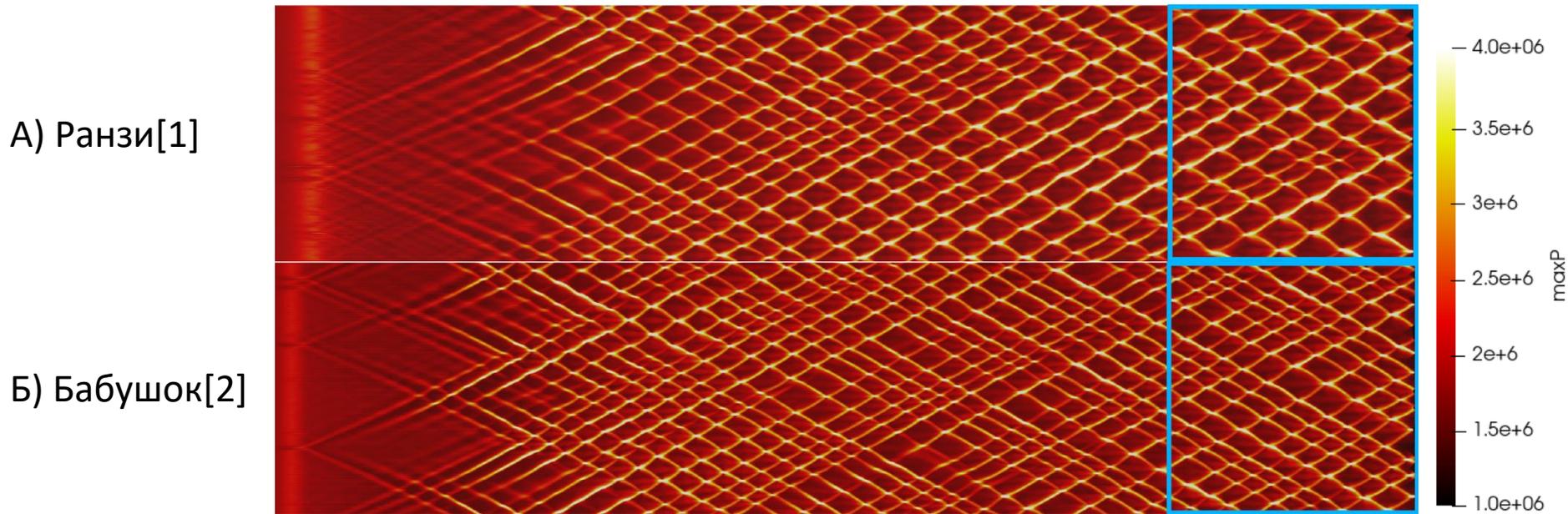


Рисунок 7. Поля максимумов давлений для кинетических механизмов Ранзи и Бабушка

Моделирование детонационных неустойчивостей. Результаты 2

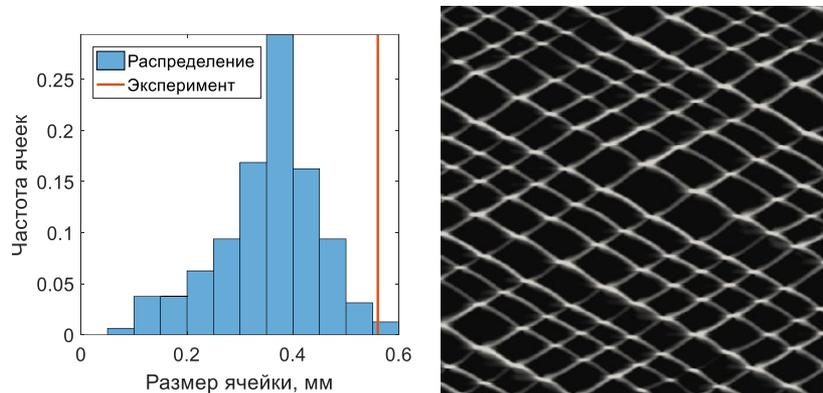


Рисунок 8. Частота возникновения ячеек определённого размера и поле максимумов давления для механизма Бабушок [3].
Экспериментальные данные [1]

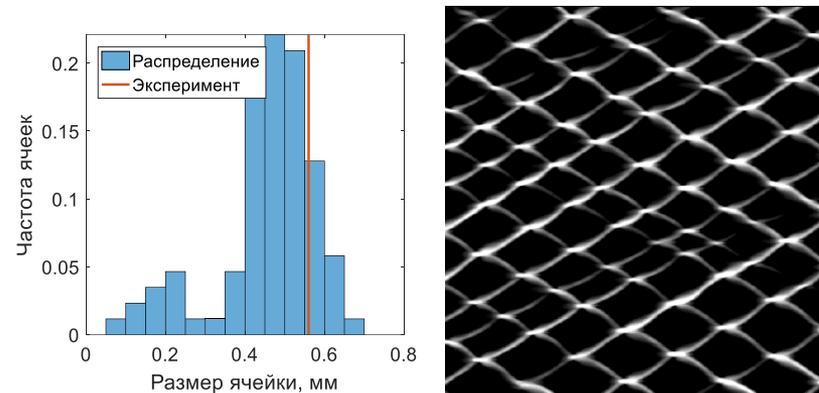


Рисунок 9. Частота возникновения ячеек определённого размера и поле максимумов давления для механизма Ranzi [2].
Экспериментальные данные [1]

1. Dorofeev, State-of-the Art Report by a Group of Experts. 2000
2. Alan Kéromnès et al., An experimental and detailed chemical kinetic modeling study of hydrogen and syngas mixture oxidation at elevated pressures / Combustion and Flame - V 160 – 2013 – pp. 995-1011
3. Бабушок В.И., и др. Структура предела цепочно-теплого самовоспламенения. Кинетика и катализ. Т. XXV, вып. 1, 1984.

Моделирование детонационных неустойчивостей. Результаты 3

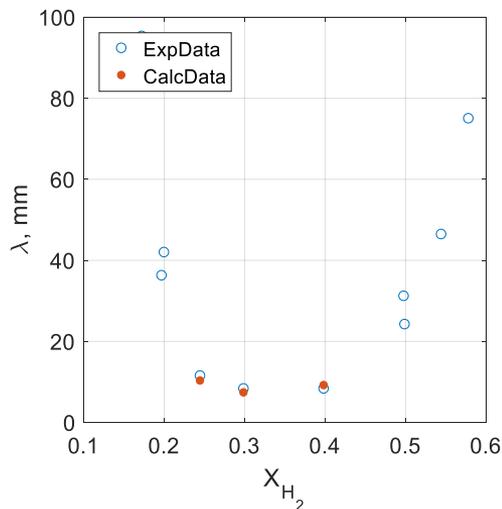


Рисунок 10. Размер рассчитанных детонационных ячеек. Экспериментальные данные [1]

X_{H_2} , %	Minmod		WENO5	
	E, %	dx, мкм	E, %	dx, мкм
24.52	10,7	18	10,09	50
29.93	11,69	18	11,03	50
39.89	10,06	18	10,39	50

Таблица 4. Относительное отклонение рассчитанных размеров детонационных ячеек от экспериментальных данных

4.

Заключение

Заключение

- Разработанный программный комплекс с использованием полного кинетического механизма позволяет оценивать характерные масштабы детонационных неустойчивостей в водород-воздушных составах
- Использование полной вычислительной кинетики имеет высокую вычислительную стоимость
- Необходимо исследовать адекватность влияния примесей (CO, CO₂, H₂O) на детонационные неустойчивости
- Необходимо снизить стоимость моделирования хим. превращений (редуцированные механизмы, PINN/PECANN)

Спасибо за внимание!

Беляев Павел Евгеньевич

E-mail: belyaevpe@vniitf.ru

