

УДК 533.27: 534.222.2

ДЕФОРМАЦИЯ ДВУМЕРНОЙ СЛЕДОВОЙ КАРТИНЫ ТЕЧЕНИЯ ДЕТОНАЦИИ ПРИ “НЕПРЕРЫВНОМ” ИЗМЕНЕНИИ ШИРИНЫ ПЛОСКОГО КАНАЛА

© 2023 г. Д. И. Кузовлев^{1,*}, В. В. Марков^{1,**}

Представлено академиком РАН А.Г. Куликовским 01.08.2022 г.

Поступило 01.08.2022 г.

После доработки 24.04.2023 г.

Принято к публикации 24.04.2023 г.

Проведено численное исследование двумерной ячеистой детонации водородно-воздушной смеси в каналах различной ширины и получены данные о процессе формирования ячеистой структуры, о количестве, форме, размере ячеек в зависимости от ширины канала. По результатам расчетов проведена классификация двумерных ячеистых структур детонации. Исследование проводилось на мощностях МСЦ РАН. Модель течения многокомпонентной реагирующей смеси реализована с использованием кастомизированного солвера opensource программного обеспечения OpenFoam на основе схемы Курганова–Тадмора.

Ключевые слова: детонационная волна, ячеистая структура, водородно-воздушная смесь, OpenFoam

DOI: 10.31857/S2686740023040089, EDN: VMXOCO

Экспериментально и теоретически установлено, что фронт детонационной волны не гладкий, с многочисленными изломами, а течение за ним неоднородное и нестационарное, что связано с наличием в потоке множества поперечных волн сжатия, периодически взаимодействующих друг с другом и со стенками канала [1–8]. В экспериментах и расчетах изломы, являющиеся тройными точками маховской конфигурации, оставляют следы на закопченных стенках канала, образующие сетку с ромбовидными ячейками. Настоящее исследование имеет целью методом вычислительного эксперимента изучить, как при непрерывном увеличении ширины канала изменяется ячеистая структура, и сопоставить полученные данные с данными других авторов, в частности, по соотношению величины зоны реакции и размера детонационной ячейки.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В двумерном нестационарном приближении рассматривается процесс инициирования и распространения самоподдерживающейся волны детонации в плоском прямоугольном канале посто-

янной ширины d и длины L по неподвижной однородной водородно-воздушной смеси с давлением P_0 и температурой T_0 , которая моделируется стехиометрической смесью молекулярного водорода H_2 , кислорода O_2 и азота N_2 .

Течение многокомпонентной реагирующей смеси с учетом эффектов переноса описывается системой уравнений в виде [9]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0,$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \times u) + \nabla p - \mu \nabla^2 u = 0,$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot [(\rho E + p)u] - \alpha \nabla^2 e = \dot{q},$$

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i u) - \mu \nabla^2 Y_i = \dot{\omega}_i, \quad i = 1, \dots, N,$$

где

$$\rho = \sum \rho_i, \quad p = \sum p_i, \quad Y_i = \frac{\rho_i}{\rho} \quad \text{и} \quad \sum Y_i = 1,$$

$$e = E - \frac{1}{2}(u \cdot u), \quad \dot{\omega}_i = \rho \frac{dY_i}{dt},$$

$$\sum \dot{\omega}_i = 0, \quad \dot{q} = \sum \dot{\omega}_i \Delta h_{f,i}^0,$$

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2}(u \cdot u),$$

¹ Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: dkuzovlev@mi-ras.ru

**E-mail: markov@mi-ras.ru



Рис. 1. Одномерная структура детонации.

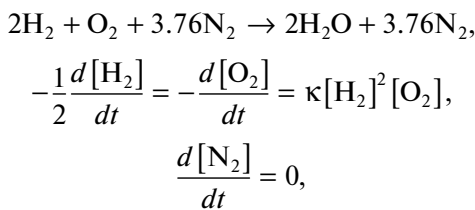


Рис. 2. Начало образования двумерной структуры детонации.

$$\begin{aligned}
 h &= \sum h_i Y_i, \quad h_i = \Delta h_{f,i}^0 + h_{s,i}, \quad h_{s,i} = \int_{T_0}^T C_{p,i} dT, \\
 C_{p,i} &= C_{p,i}(T), \quad C_p = \sum C_{p,i}, \quad C_v = C_p - R, \\
 p &= \sum p_i = \sum \rho_i \frac{R}{M_i} T, \\
 \mu &= \frac{A_s \sqrt{T_s}}{1 + \frac{T_s}{T}} - (\text{модель Сазерленда}), \\
 \alpha &= \frac{k}{c_p \rho}, \quad k = \mu c_v \left(1.32 + \frac{1.77R}{c_v} \right) \quad (\text{закон Эйкена}).
 \end{aligned}$$

Все обозначения стандартные, $C_{p,i}$ – теплоемкость i -го компонента при постоянном давлении (аппроксимируется полиномом на основании таблиц JANAF).

Для описания химического взаимодействия используется одностадийная кинетика горения [10]:



где $\kappa = AT^\beta e^{-\frac{E_a}{RT}}$, $E_a = T_a R$, $T_a = 12996$ К, $A = 1.4 \times 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $\beta = 0$, κ – константа скорости химической реакции, E_a и T_a – энергия и температура активации.

В настоящей работе не учитывались эффекты переноса ($\alpha = 0$, $\mu = 0$), и поэтому на непроницаемых границах канала $\bar{u}_1 = 0$.

Предполагается, что канал заполнен однородной стехиометрической смесью водород–кислород–азот, а инициирование детонации осуществляется мгновенным подводом энергии у закрыто-

го конца канала. Для этого в начальный момент времени задается линейное распределение температуры от 2000 К у закрытого края канала до 300 К на расстоянии 0.01 м, а далее в сторону открытого конца газ находится при $T_0 = 300$ К, $P_0 = 1$ атм. При этом, как показали расчеты, происходит “мягкое” инициирование детонации без формирования сильно пересжатой детонационной волны.

Для численного решения уравнений газовой динамики использовался кастомный солвер на базе библиотек opensource программного обеспечения OpenFoam [11], основанный на схеме второго порядка Курганова–Тадмора. Расчеты проводились на сетке с квадратными ячейками со стороной 3 мкм. Такой размер расчетной ячейки разрешал зону реакции, на которую приходилось ~30 расчетных ячеек (~90·мкм).

Компьютерная модель была верифицирована с помощью вспомогательных исследований:

- 1) был проведен вычислительный эксперимент для определения времени задержки воспламенения исследуемой смеси в теплоизолированном сосуде;
- 2) была рассчитана скорость детонационной волны в канале. Ее значение соответствовало результатам, полученным в реальных экспериментах (~2050 м/с).

Была проведена серия из 60 вычислительных экспериментов для каналов, ширина которых от эксперимента к эксперименту возрастала на величину стороны 3·мкм. По полям максимума давления в точках расчетной области построены аналоги получаемых в эксперименте картин следов тройных точек в виде сеток с ромбовидными ячейками, которые представлены на рис. 1–8. Продолжительность расчета выбиралась так, чтобы к моменту его окончания сформировалась регулярная ячеистая структура.



Рис. 3. Появление и распад ромбовидной ячейки.

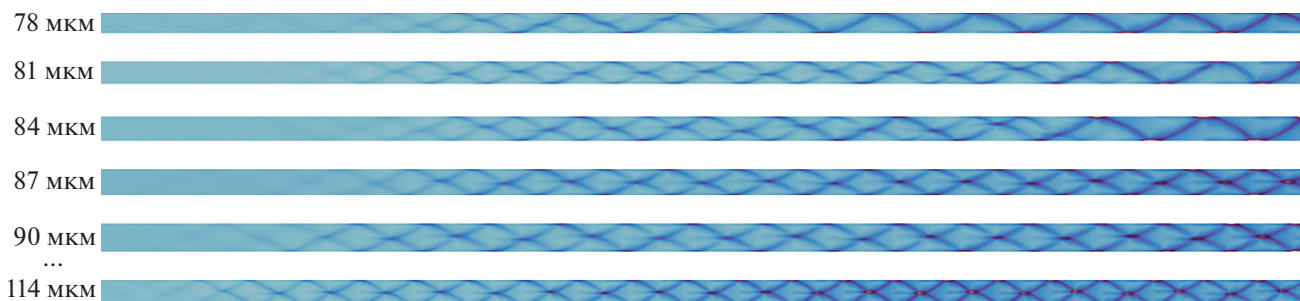


Рис. 4. Появление и распад одной ячейки и стабилизация на одной ячейке.

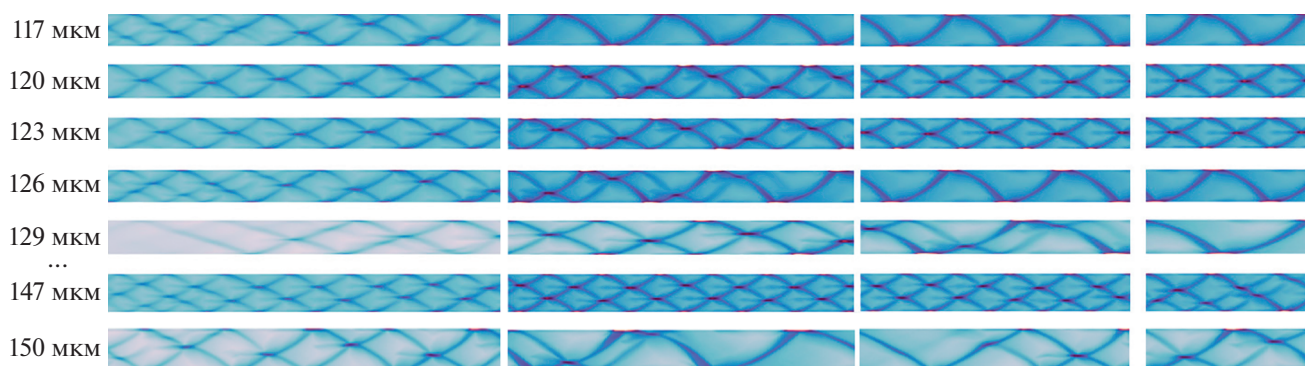


Рис. 5. Ячеистая структура при $d = 117–150$ мкм.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Согласно проведенным расчетам при $d = 3–12$ мкм наблюдается одномерная картина детонации (рис. 1).

Начиная с $d = 15$ мкм на следовой диаграмме становятся заметны поперечные волны и наблюдается двумерная картина с одной поперечной волной (с “треугольной” ячейкой). Форма ячейки не меняется за время эксперимента (рис. 2).

При $d = 75$ мкм первый раз появляется одна ромбовидная ячейка (рис. 3), но вскоре распадается.

При $d = 75–90$ мкм возникают ромбовидные детонационные ячейки, но они также распадаются за время эксперимента. Для практически всех $d = 90–114$ мкм за все время эксперимента стабильно наблюдаем одну ячейку (рис. 4).

При $d = 117$ мкм первый раз возникают полторы ячейки (рис. 5). И дальше при увеличении ширины практически всегда на старте полторы ячейки. При $d = 117–150$ мкм в целом больше неустойчивостей, чем в прошлом интервале ширин. В 6 случаях из 10 в конце эксперимента структура

распадается до треугольных детонационных ячеек. При $d = 150$ мкм впервые возникает ситуация распада ячейки в половину и потом возврат к целой ячейке и затем опять переход в половину.

При $d > 153$ мкм на старте всегда наблюдалось 1.5–2 ячейки, и в процессе течения несколько раз повторялась ситуация распада регулярной структуры и возврата обратно: полторы ячейки, одна, половина, одна, половина (рис. 6). К концу расчета структура переходила как в режим с треугольными ячейками, так и с одной целой ячейкой.

При $d = 174–180$ мкм одна ячейка уже не появляется, и в конце расчета – 1.5 ячейки (рис. 7).

Резюмируя результаты экспериментов, можно сформулировать следующее:

1. Детонация не затухает за время эксперимента при всех ширинах канала.
2. С увеличением ширины канала d растет количество ячеек на старте детонации.
3. Количество ячеек меняется со временем симуляции (но не увеличивается, на старте всегда максимальное количество).

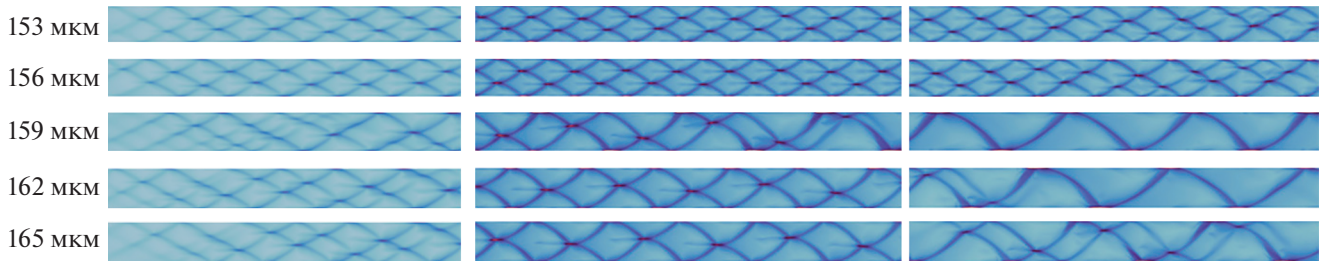


Рис. 6. Ячеистая структура при $d = 153–165$ мкм. Распад регулярной структуры и возврат обратно.

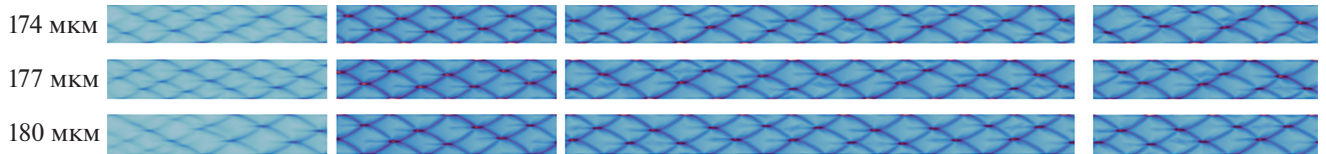


Рис. 7. Ячеистая структура при $d = 174–180$ мкм.

4. Изредка существуют ситуации, когда детонационная ячейка распадается в половинку, а потом собирается вновь и т.д.

5. Перед распадом ячейки нарушается ее симметричность относительно горизонтали — центральные максимумы колеблются вверх-вниз.

6. После распада ячейки давление в максимумах (углах ячейки) выше, чем до распада.

7. Координата x , при которой впервые за время эксперимента появляется ячеистая структура, меняется в зависимости от d , явной корреляции с d не наблюдается.

Размеры детонационной ячейки на старте детонации в зависимости от ширины канала приведены на рис. 8. Видно, что высота целой (ромбовидной) детонационной ячейки на старте достигает 120 мкм. Максимальная высота целой ячейки за время эксперимента — 171 мкм.

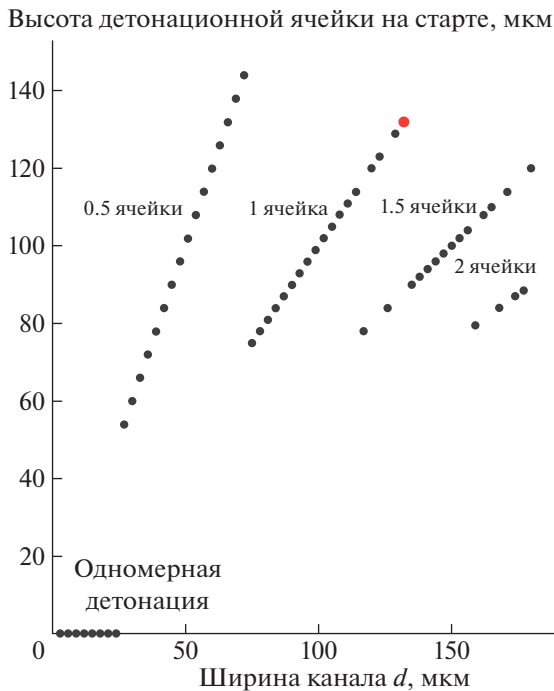


Рис. 8. Высота детонационной ячейки на старте в зависимости от ширины канала.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено исследование тонкой структуры детонационной волны в тонких каналах различной (малой) ширины. Получены данные о процессе формирования ячеистой структуры, о количестве, форме, размере ромбовидных и треугольных ячеек в зависимости от ширины канала. По результатам расчетов проведены исследование и классификация полученных двумерных ячеистых структур детонации.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Расчеты проводились на МСЦ РАН в рамках проекта “Исследование ячеистой структуры детонационной волны” за счет средств по гранту Российского научного фонда № 19-17-30012.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Солоухин Р.И. Детонационные волны в газах // УФН. 1963. Т. 80. № 4. С. 525–551.
2. Guirao C.M., Knystautas R., Lee J.H.S. A Summary of Hydrogen-Air Detonations for Reactor Safety. Report

- NUREG/CR-4961, Sandia National Laboratories/McGill University, 1989.
3. Radulescu M.I., Sharpe G.J., Law C.K., Lee J.H.S. The hydrodynamic structure of unstable cellular detonations // *J. Fluid Mechanics*. 2007. V. 580. P. 31–81.
 4. Марков В.В. Численное моделирование образования многофронтной структуры детонационной волны // *ДАН СССР*. 1981. Т. 258. № 2. С. 314–317.
 5. Левин В.А., Мануйлович И.С., Марков В.В. Возбуждение и срыв детонации в газах // *Инженерно-физический журнал*. 2010. Т. 83. № 6. С. 1174–1201.
 6. Левин В.А., Мануйлович И.С., Марков В.В. Ячеистая структура расходящейся цилиндрической волны детонации // *ДАН*. 2011. Т. 439. № 1. С. 48–50.
 7. Левин В.А., Мануйлович И.С., Марков В.В. Трехмерная ячеистая детонация в цилиндрических каналах // *ДАН*. 2015. Т. 460. № 1. С. 35–38.
 8. Левин В.А., Журавская Т.А. Управление детонационным горением посредством предварительной подготовки газовой смеси // *Письма в ЖТФ*. 2020. Т. 46. № 4. С. 40–44.
 9. Кuo K. *Principles of Combustion*. Wiley, 2nd edition, 2005.
 10. Marinov N.M., Westbrook C.K., Pitz W.J. Detailed and global chemical kinetics model for hydrogen // *Transport Phenomena in Combustion*. 1996. № 1. P. 118–129.
 11. <https://openfoam.org>, <https://github.com/dunham/rhoReactingCentralFoam>

DEFORMATION OF A TWO-DIMENSIONAL TRACE PATTERN OF A DETONATION FLOW WITH A “CONTINUOUS” CHANGE IN THE WIDTH OF A FLAT CHANNEL

D. I. Kuzovlev^a and V. V. Markov^a

^a *Steklov Mathematical Institute of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

Presented by Academician of the RAS A.G. Kulikovskii

A numerical study of two-dimensional cellular detonation of a hydrogen-air mixture in channels of various widths was carried out and data were obtained on the process of formation of a cellular structure, on the number, shape, and size of cells depending on the channel width. Based on the results of calculations, a classification of two-dimensional cellular detonation structures was carried out. The study was carried out at the facilities of the JSCC RAS. The flow model of a multicomponent reacting mixture was implemented using a customized opensource solver of the OpenFoam framework based on the Kurganov–Tadmor scheme.

Keywords: Detonation wave, Cellular structure, Hydrogen-air mixture, OpenFoam