

Исследование ячеистой детонации для различных кинетических механизмов

Никитин В.Ф., Михальченко Е.В., Смирнов Н.Н.

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
г. Москва*

ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, г. Москва

**XV Всероссийский симпозиум по
горению и взрыву
Москва, 29 ноября — 4 декабря 2020**

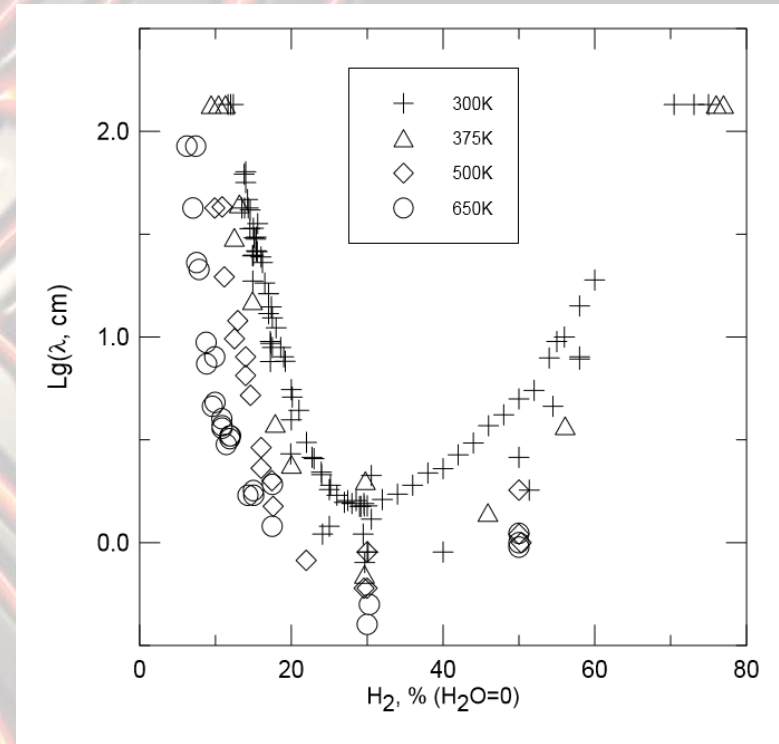


Никитин В.Ф.
vfnikster@gmail.com

Экспериментальные данные о размерах детонационных ячеек

В случае водорода с воздухом, разбавленным паром, многочисленные экспериментальные данные были обобщены с помощью формулы, зависящей от 4 параметров.

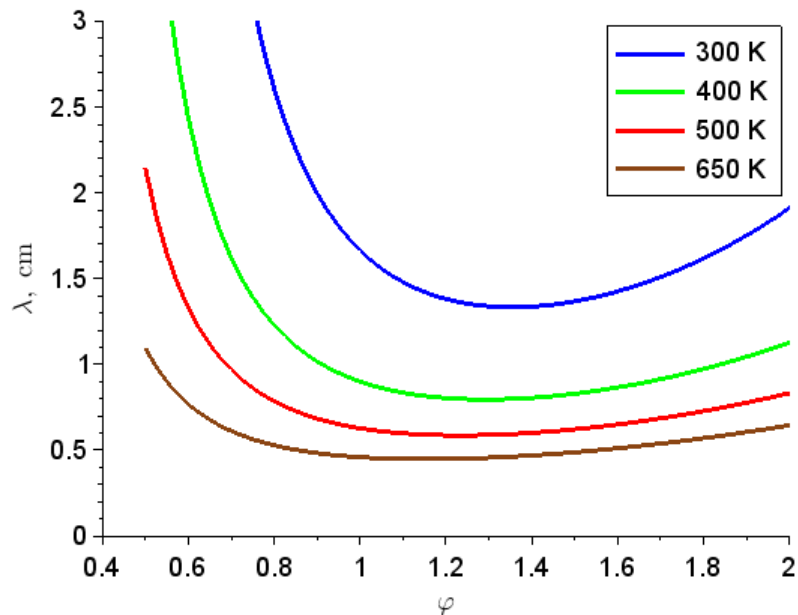
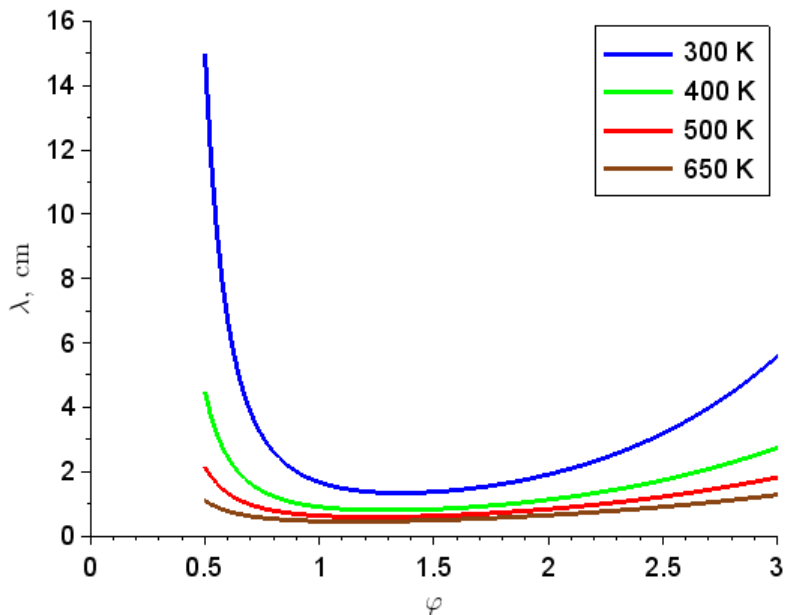
Dr. Sergei B. Dorofeev, Appendix D.
Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Nuclear Safety.
State-of-the Art Report
by a Group of Experts. Nuclear Safety
NEA/CSNI/R(2000)7 August 2000.
(OECD Nuclear Energy Agency Le Seine
Saint-Germain - 12, boulevard des Oles F-
92130 Issy-les-Moulineaux, France
Tel. +33 (0)1 45 24 82 00 - Fax +33 (0)1 45 24
11 10 Internet: <http://www.nea.fr>



Важное отличие условий эксперимента по выявлению ячеек детонации от обычного двумерного моделирования

- Эксперимент проводится в круглой трубе, на поверхность которой нанесена фольга с напылением (обычно графит). При прохождении ударных и детонационных волн силовое воздействие на напыление оставляет след.
- В результате на данные эксперимента большое значение оказывает взаимодействие волны детонации с поверхностью в пограничном слое. В частности, обрыв цепей реакций при взаимодействии с материалом стенки и с самим напылением.
- Расчет проводится в 2D области без учета взаимодействия со стенкой. Граничные условия на боковых стенках могут быть закрытыми, открытыми или открытыми с одной стороны. Если взаимодействие со стенкой и учитывается, то лишь локально, а не по всему домену, как было бы в случае рассмотрения пограничного слоя вблизи стенки по всей рабочей области.

Результаты интерполяционных данных для сухого водорода с воздухом при начальных $P=1\text{MPa}$, $T=300 - 650\text{ K}$



В широком и более узком диапазоне соотношения эквивалентности

Математическая модель

1) Модель многокомпонентной газовой динамики

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_k u_j) = \dot{\omega}_k(\rho_1, \dots, \rho_{N_c}, T)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_i} = 0$$

$$\frac{\partial E_T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} ((E_T + p) u_j) = \dot{Q}$$

2) Модель химической кинетики:

а) GriMech 3.0 (1999, 20 реакций);

GRI-Mech Version 3.0 7/30/99

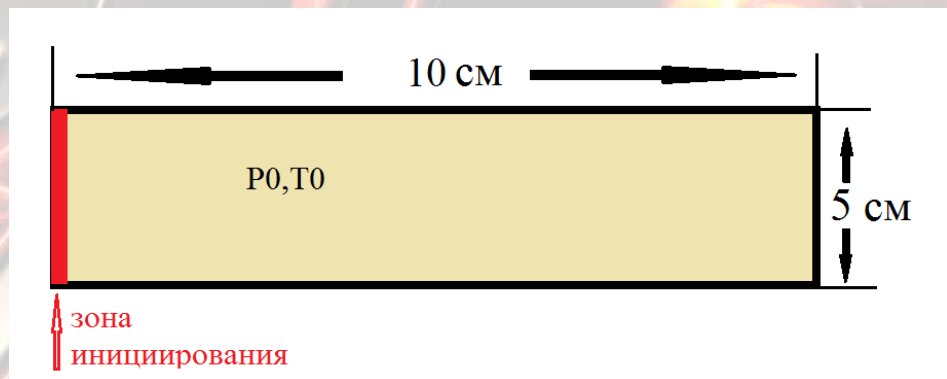
CHEMKINII format,

at http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.

б) Hong (2010, 20 реакций);

Z. Hong, R.D. Cook, D.F. Davidson, R.K. Hanson.

J. Phys. Chem. A. 2010. Vol. 114 (18). P. 5718-5727.

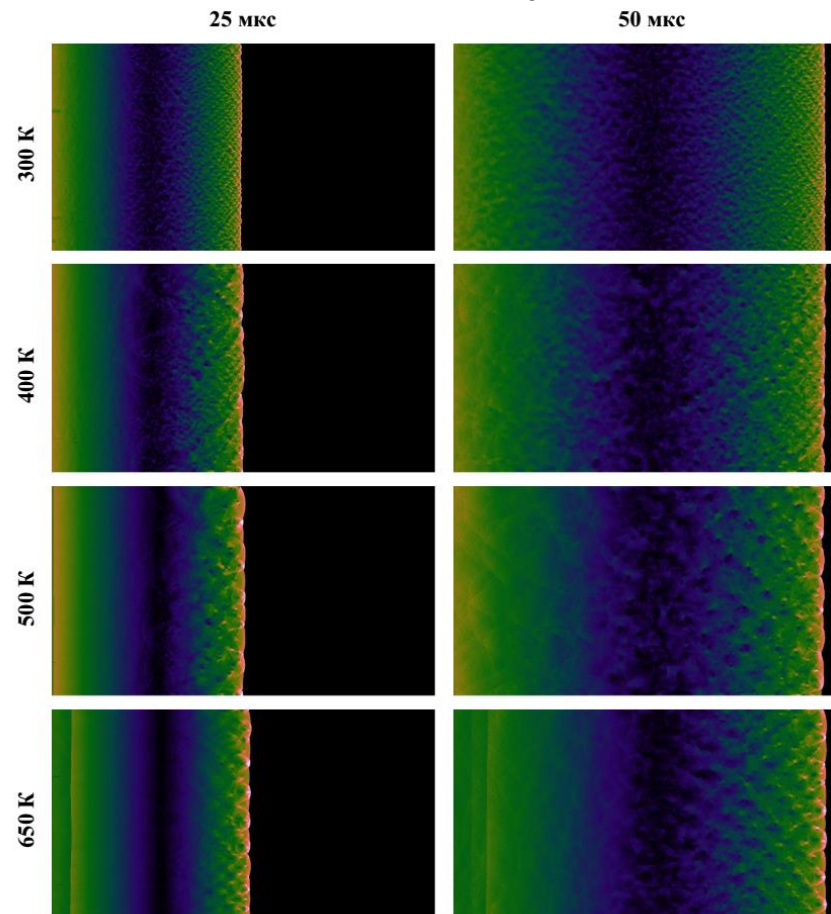
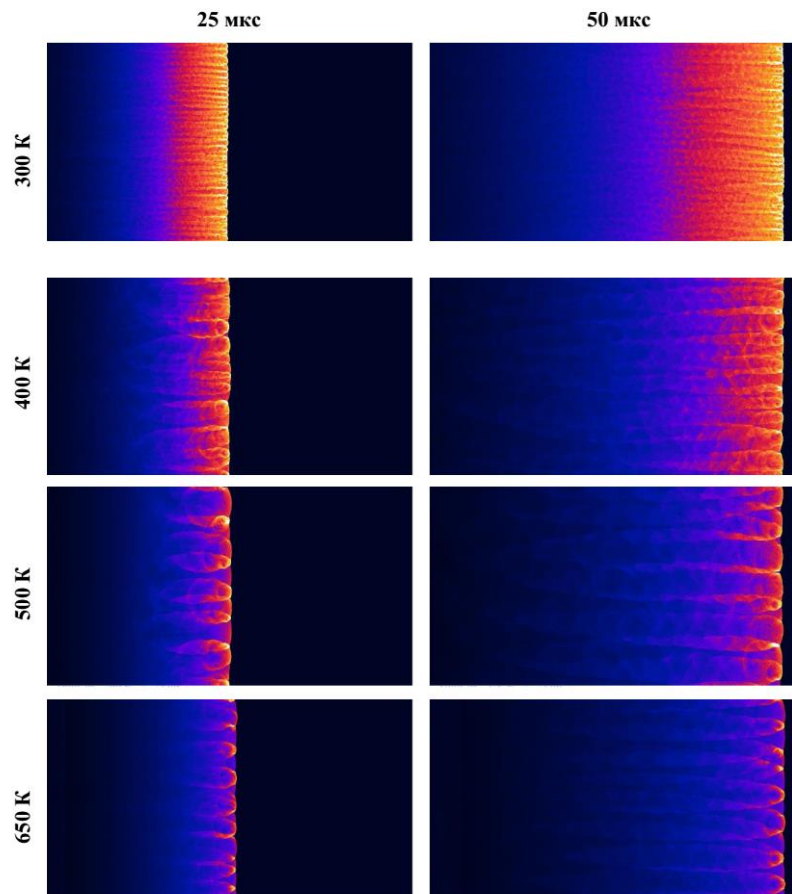


- Прямоугольный домен, изначально 10x5 см, возможно расширение вправо.
- Вдоль коротких сторон стенки свободный выход, вдоль длинных может быть поставлено как условие свободного выхода, так и жесткая стенка.
- Инициирование выделением энергии либо энергии и массы с тем, чтобы заведомо возникла пересжатая детонация (форсирование прямого инициирования детонации).
- Начальные возмущения выделения энергии и массы, не зависящие от размера сетки. Требуется для ускорения развития неустойчивости фронта.
- Равномерная сетка из квадратных ячеек в 2D геометрии 25 мкм.

Результаты (модель Hong 2010)

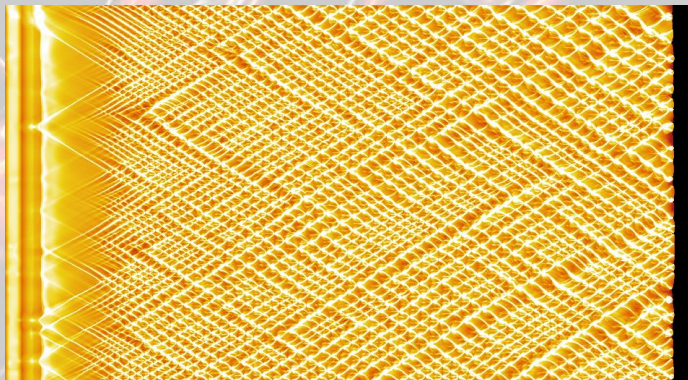
Распределение давления

Распределение модуля скорости

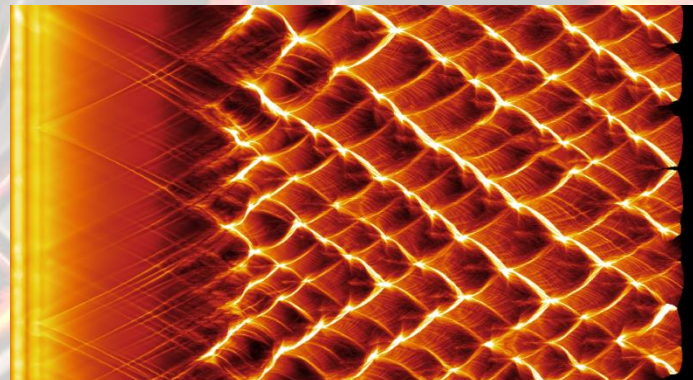


Распределение максимально достигнутого давления

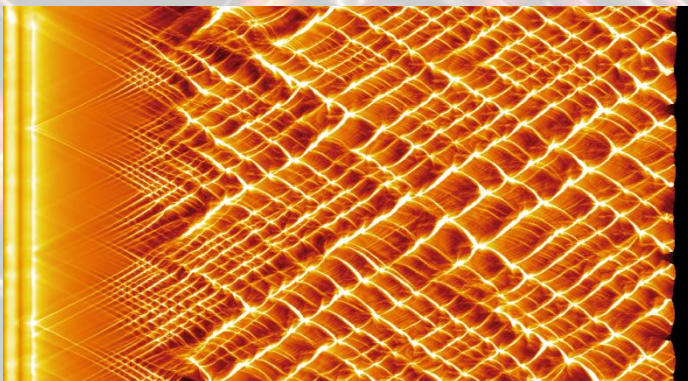
300 K



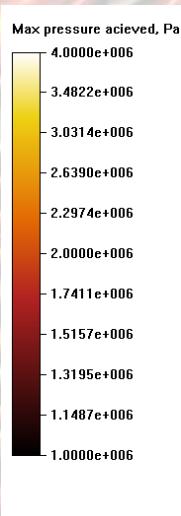
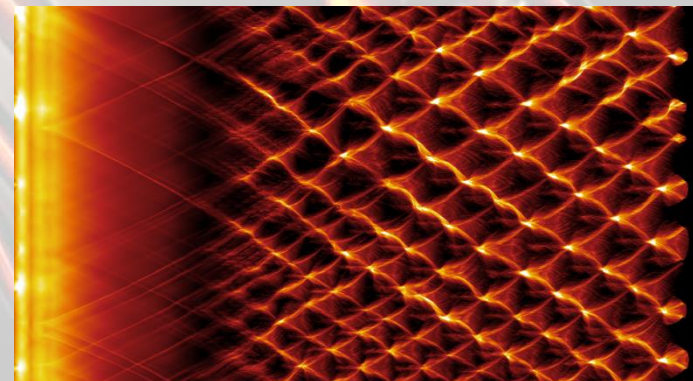
500 K



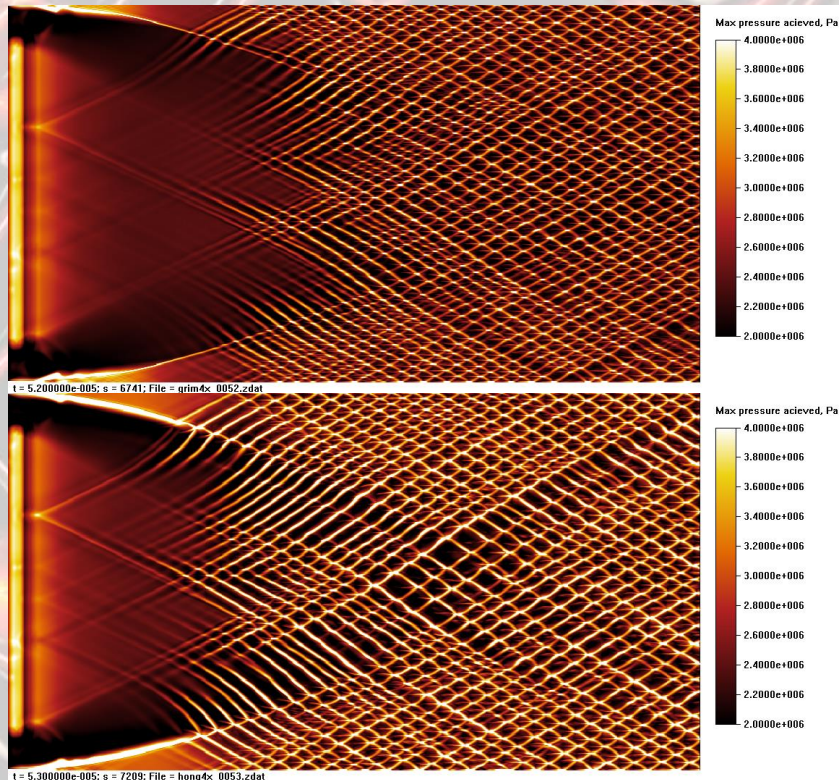
400 K



650 K



Сравнение двух кинетических механизмов, GRI 3.0 (1999) vs Hong (2010), $T_0 = 300\text{ K}$



Механизм Hong приводит к большим и более разнообразным размерам ячеек, чем GRIMech; ячейки увеличиваются на стыке «отражений» областей с изначально более крупными ячейками. Имеются случаи деградации движущихся пучностей, равно как возникновения дополнительных. На механизме GRI это заметно слабее, если вообще это видно.

Теория предсказывает размер ячейки для стехиометрической смеси 1.6 см (с поправкой на разброс данных). Максимальная же полученная ячейка здесь не более 0.5 см, прочие меньше, до 0.2 см. Это нуждается в объяснении.

Сравнение расчетного и экспериментального размера ячеек для механизма Hong (2010)

Температура	Расчет (см)	Эксперимент (см)
300 К	0.2-0.3	1.6
400 К	0.4-0.5	0.9
500 К	0.6-0.7	0.7
650 К	0.5-0.6	0.5

Выводы:

Высокая чувствительность расчета ячейистой детонации к выбору кинетического механизма.

Несовпадение данных для низкой начальной температуры.

Получено приближенное совпадение с экспериментальными данными для начальной температуры от 500 К и выше.

Для меньшего значения температуры ячейка меньше экспериментальной.

Возможное объяснение: данные получены для достаточно малого времени развития процесса. Иные граничные условия эксперимента.