Math-Net.Ru
All Russian mathematical portal

V. A. Volkov, V. Yu. Gidaspov, V. Yu. Strel'tsov, Numerical simulation of reacting gas mixtures flows behind reflected shock waves,
Mat. Model., 1999, Volume 11, Number 2, 74–80

https://www.mathnet.ru/eng/mm1063

Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you have read and agreed to these terms of use
https://www.mathnet.ru/eng/agreement

Download details:
IP: 18.97.14.90
July 8, 2025, 21:11:45

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

том 11 номер 2 год 1999

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ РЕАГИРУЮЩИХ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ ЗА ОТРАЖЕННЫМИ УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ

© *В.А. Волков, В.Ю. Гидаспов, В.Ю. Стрельцов*

Московский государственный авиационный институт (технический университет), Москва

Работа выполнялась при поддержке РФФИ (грант № 97–01–00939)

NUMERICAL SIMULATION OF REACTING GAS MIXTURES FLOWS BEHIND REFLECTED SHOCK WAVES

V.A. Volkov, V.Yu. Gidaspov, V.Yu. Strel'tsov

Moscow State Aviation Institute (Technical University), Moscow

Рассматриваются течения реагирующего газа, которые реализуются в экспериментах по определению времени задержки воспламенения горючих смесей за отраженными ударными волнами (ОУВ). В этих экспериментах горючая смесь заполняет часть ударной трубы, примыкающую к плоскому отражающему торцу. Сформировавшаяся ранее плоская ударная волна проходит по горючей смеси дважды, так как условия, достаточные для ее воспламенения, достигаются только после того, как волна отражается от торца и начинает распространяться в обратном направлении [1,2].

При численном моделировании предполагалось, что соответствующие течения являются одномерными, и что влиянием вязкости, диффузии и теплопроводности можно пренебречь. Химические реакции в газовой смеси начинают протекать только за ОУВ, а до того они остаются «замороженными». Течение, которое возникает после первого прохода ударной волны, является однородным. Поэтому оно рассчитывалось заранее, и в дальнейшем все течение перед ОУВ полагалось известным. Течение реагирующей газовой смеси за отраженной ударной волной рассчитывалось численно с помощью одномерных нестационарных уравнений газовой динамики (соответствующую модель в дальнейшем для краткости будем называть "одномерной"):

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x}\rho u = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho u + \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho u^2 + p\right) = 0, \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\left(e+0.5u^2\right)+\frac{\partial}{\partial x}\rho u\left(h+0.5u^2\right)=0, \tag{3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\gamma_i+\frac{\partial}{\partial x}\rho u\gamma_i=W_i, \qquad i=1,\ldots,N. \tag{4}$$

Здесь $\rho,u,p,e,h,\gamma_i,W_i$ – соответственно плотность, скорость, давление, удельные внутренняя энергия, энтальпия и молярные содержания химических компонент газовой смеси, а также объемные скорости газофазных химических превращений.

Термодинамические свойства реагирующего газа описывались с помощью модели многокомпонентного совершенного газа в рамках допущения о равновесной заселенности энергетических уровней, отвечающих всем внутренним степеням свободы молекул и атомов. В указанном случае удельный термодинамический потенциал Гиббса имеет следующий вид [3]:

$$G(p,T,\gamma)=\sum_{(i)}\gamma_i[RT\ln(p_i/p_0)+G_i^0(T)], \qquad p_i=p\gamma_i(\sum_{(j)}\gamma_j)^{-1}, \tag{5}$$

где R – универсальная газовая постоянная, p_0 – стандартное давление, $G_i^0(T)$ – стандартные молярные потенциалы Гиббса отдельных компонент. Прочие термодинамические величины многокомпонентного газа выражаются через $G(p,T,\gamma)$ и его частные производные, например:

$$\rho=\left[\frac{\partial G}{\partial p}\right]^{-1}=p(RT\sum_{(i)}\gamma_i)^{-1}, \qquad h=-T^2\frac{\partial}{\partial T}\left[\frac{G}{T}\right], \qquad e=h-RT\sum_{(i)}\gamma_i. \tag{6}$$

Кинетический механизм газофазных реакций полагался многостадийным и состоящим из обратимых элементарных реакций от первого до третьего порядка включительно [4]:

$$\sum_{(i)}\vec{\nu}_i^{(r)}M_i \underset{\overleftarrow{K}^{(r)}}{\overset{\overrightarrow{K}^{(r)}}{\rightleftarrows}} \sum_{(i)}\overleftarrow{\nu}_i^{(r)}M_i, \qquad \vec{\bar{q}}^{(r)}=\sum_{(i)}\vec{\bar{\nu}}_i^{(r)}, \qquad 1\le\vec{\bar{q}}^{(r)}\le 3. \tag{7}$$

Здесь r – номера стадий, $\vec{\bar{\nu}}_i^{(r)}$ – стехиометрические коэффициенты, $\vec{\bar{q}}^{(r)}$ – порядки соответствующих реакций, M_i – символы молекул или атомов химических компонент. Выражения для W_i, входящие в (4), имеют следующий вид:

$$W_i=\sum_{(r)}(\overleftarrow{\nu}_i^{(r)}-\vec{\nu}_i^{(r)})(\vec{W}^{(r)}-\overleftarrow{W}^{(r)}), \qquad \vec{\bar{W}}^{(r)}=\vec{\bar{K}}^{(r)}(T)\exp\left[\sum_{(i)}\vec{\bar{\nu}}_i^{(r)}\ln(\rho\gamma_i)\right]. \tag{8}$$

С целью согласования кинетики с термодинамикой, использовалась следующая связь между константами скоростей каждой пары взаимно–обратных реакций (7):

$$\frac{\vec{K}^{(r)}(T)}{\overleftarrow{K}^{(r)}(T)}=\exp\left[\sum_{(i)}(\overleftarrow{\nu}_i^{(r)}-\vec{\nu}_i^{(r)})\left(\frac{G_i^0(T)}{RT}+\frac{\ln RT}{p_0}\right)\right]. \tag{9}$$

Аппроксимация температурной зависимости констант скоростей газофазных реакций

$$K(T)=A\exp\left(-\frac{E}{RT}+n\ln T\right) \tag{10}$$

использовалась для одной из двух констант $\vec{K}^{(r)}(T)$ или $\overleftarrow{K}^{(r)}(T)$, а именно для той из них, для которой имеются более надежные справочные данные по параметрам A,n,E.

Дифференциальные уравнения, описывающие одномерное нестационарное течение реагирующей газовой смеси, аппроксимировались конечно-разностными аналогами по неявной схеме сеточно-характеристического метода. Возникавшие при этом системы конечно-разностных уравнений решались численно с помощью оригинального итерационного алгоритма. В расчетах применялась разностная сетка, максимально адаптированная к рассматриваемым течениям. Она состояла из подвижных узлов, один из которых отслеживал текущее положение ОУВ, а остальные двигались с местной скоростью газа вдоль траекторий. Число отслеживаемых траекторий газа увеличивалось по мере удаления ОУВ от торца ударной трубы. Новые траектории добавлялись через равные промежутки времени в точке, совпадающей с текущим положением ОУВ.

В работе представлены результаты моделирования двух экспериментов из [1] (табл.1).

Таблица 1.

Номер варианта	Состав смеси в объемных %			Параметры газа за отраженной ударной волной в момент отражения		
	CH_3OH	O_2	Ar	Температура, К	Давление, МПа	Скорость ОУВ, м/с
1	2	4	94	1570	0.12	448
2	1	2	97	2125	0.37	514

Для моделирования газофазного окисления метанола использовался детальный кинетический механизм, состоящий из 84 обратимых реакций и включающий 26 химических компонент [5].

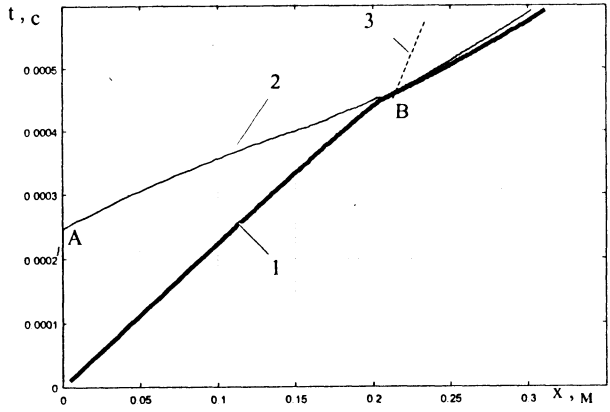

Рис.1. Временная развертка процесса. 1 – траектория ОУВ, 2 – фронт воспламенения, 3 – контактный разрыв, А – точка схода фронта воспламенения со "стенки", В – точка взаимодействия фронта воспламенения с ОУВ.

На рис.1-3 представлены результаты численного моделирования воспламенения смеси для варианта 1. В начальный момент времени (t=0) образуется ОУВ (рис.1), которая распространяется по холодной горючей смеси. В точке А происходит воспламенение горючей смеси у торца ударной трубы (x=0). К этому моменту ОУВ находится на расстоянии 0.13 м от торца. Образовавшийся фронт воспламенения (рис.1) движется вслед за ОУВ и догоняет ее в точке В. Отраженная ударная волна ускоряется (рис.1), температура (рис.2) и давление (рис.3) в точке за ОУВ (крайняя правая точка на кривых) растут. Образуется контактный разрыв. Ему соответствует скачкообразное изменение температуры (рис.2) при непрерывно меняющемся давлении (рис.3). Далее ОУВ и фронт воспламенения распространяются совместно, образуя пересжатую детонационную волну.

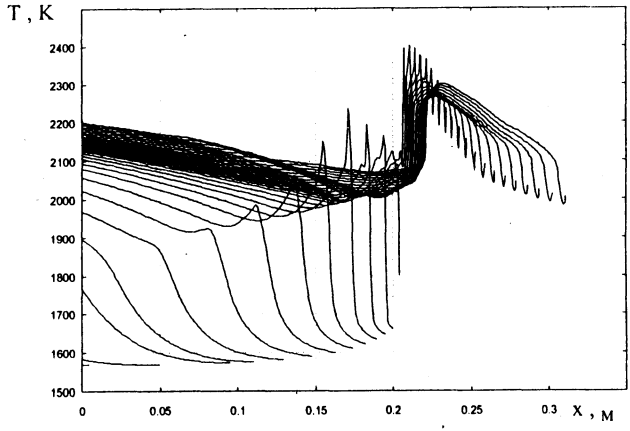

Рис.2. Распределения температуры.

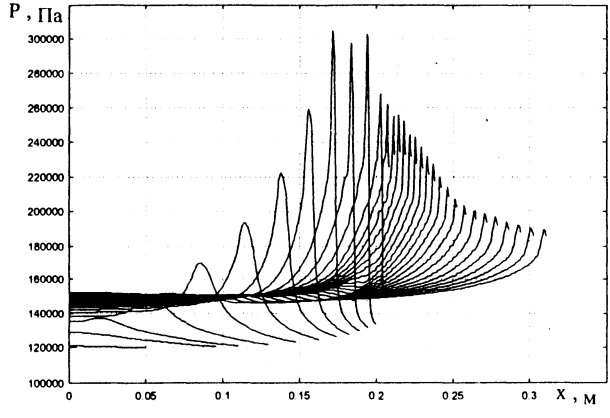

Рис.3. Распределения давления.

Для определения времени задержки воспламенения в экспериментах [1] измерялись параметры излучения, которое приходило из объема газа, расположенного на расстоянии 1 см от торца. В частности, в каждом эксперименте получались осциллограммы мощности этого излучения в нескольких достаточно узких диапазонах оптического спектра. Момент воспламенения определялся по точке максимума на полученной осциллограмме мощности излучения на волне λ=370 нм. При моделировании экспериментов, в качестве критерия воспламенения рассматривалась точка максимума на зависимости произведения концентраций CO и O от времени [1, 5]. Отметим, что в большинстве работ константы скоростей ключевых реакций подбираются путем численного моделирования постановки рассматриваемых экспериментов, с использованием предположений, что процесс воспламенения за отраженной ударной волной протекает при постоянном объеме и является адиабатическим [1, 5]. В этом случае само течение реагирующей газовой смеси можно вообще не рассчитывать и решать следующую систему уравнений:

$$\frac{d\rho}{dt} = 0, \qquad \frac{de}{dt} = 0, \qquad \frac{d\gamma_i}{dt} = \frac{1}{\rho} W_i. \tag{11}$$

Данную модель в дальнейшем будем называть “нульмерной”.

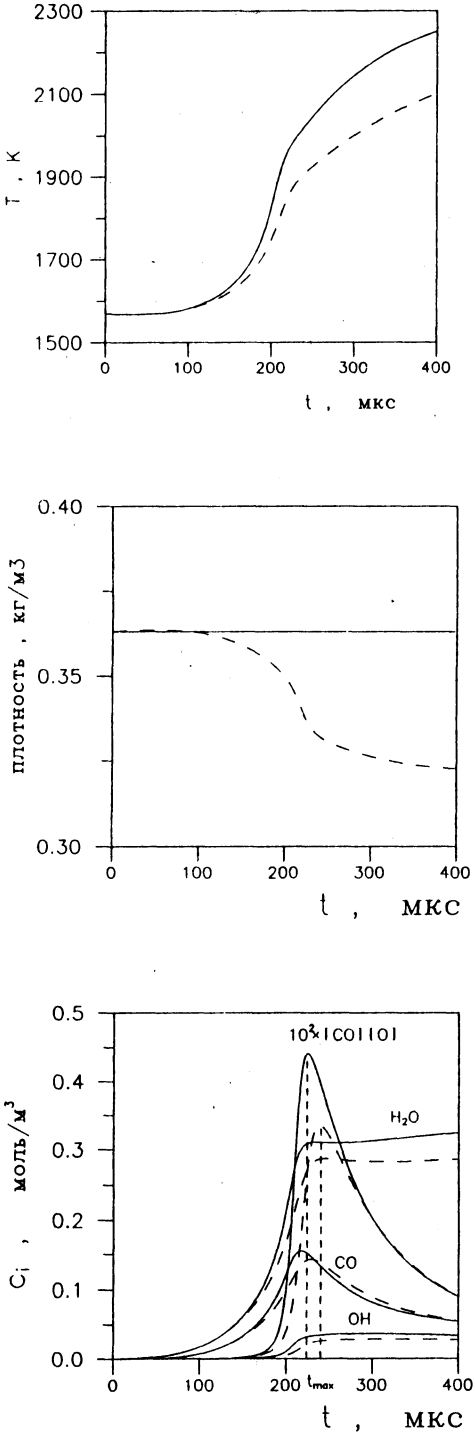
T , K
t , мкс
плотность , кг/м3
t , мкс
C_i , моль/м^3
$10^2 \times [CO][O]$
H_2O
CO
OH
t_{max}
t , мкс

Рис.4.

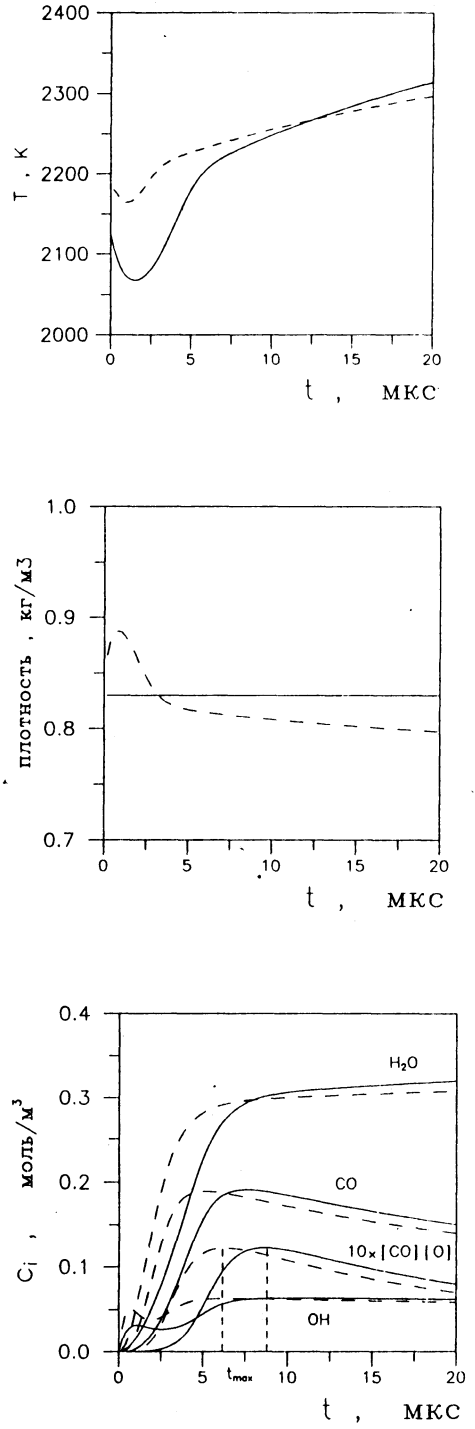
T , K
t , мкс
плотность , кг/м3
t , мкс
C_i , моль/м^3
H_2O
CO
$10 \times [CO][O]$
OH
t_{max}
t , мкс

Рис.5.

С целью проверки корректности использования указанных предположений, были проведены расчеты процесса воспламенения горючих смесей по "одномерной" и "нульмерной" моделям.

На рис.4, 5 представлены результаты численного моделирования с использованием обеих моделей для вариантов 1 и 2 (табл.1). Здесь приведены графики поведения во времени температуры, плотности, концентраций CO, OH, H_2O и произведения концентраций CO и O . Штриховыми линиями изображены графики, полученные в рамках "одномерной" модели. Данные графики построены для точки, удаленной от торца на расстояние 1 см, так как именно в ней в экспериментах [1] измерялись параметры излучения. При этом за нулевой момент времени принимается время прохождения ОУВ точки x=1 см. Сплошные линии соответствуют результатам расчетов по "нульмерной" модели. На графиках для концентраций вертикальными штриховыми линиями отмечены точки t_{max}, соответствующие моментам воспламенения (согласно критерию, упомянутому выше). Из рис.4 и 5 видно, что значения времени задержки воспламенения, рассчитанные по двум используемым моделям, отличаются. Характер этих отличий связан со степенью влияния возмущений, возникающих за ОУВ при сгорании смеси, на ход процесса воспламенения горючей смеси в точке, где проводятся измерения. Так, для первого варианта, к моменту достижения ОУВ точки x=1 см, воспламенения горючей смеси между торцом и этой точкой практически не наблюдается (см. также рис.1–3), поэтому рассчитанные времена воспламенения отличаются незначительно (менее чем на 10 %). Во втором варианте реализуется случай, когда образующийся фронт воспламенения догоняет ОУВ еще до точки x=1 см. Влияние фронта воспламенения на горение смеси в интересующей точке приводит к тому, что время задержки воспламенения t_{max}, рассчитанное по "нульмерной" модели, является существенно большим (на 50%) по отношению к t_{max}, рассчитанному по "одномерной" модели. Из рисунков видно также, что допущение о том, что воспламенение за ОУВ происходит при постоянной плотности, не соответствует реальности.

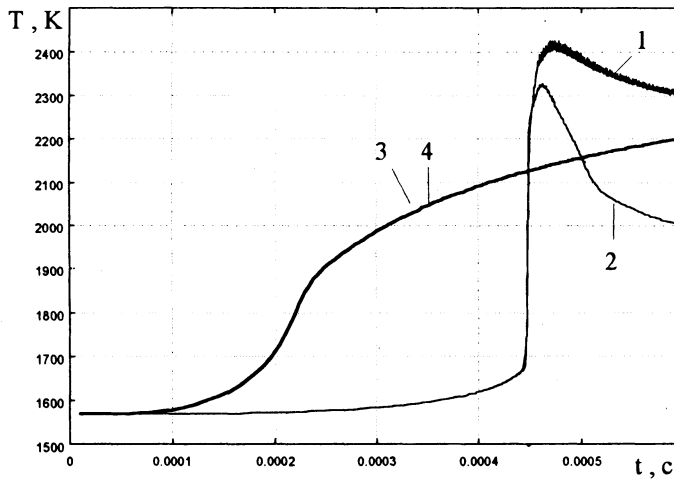

Рис.6. Зависимость температуры от времени.

Из представленных результатов можно сделать вывод, что в тех случаях, когда воспламенение горючей смеси на участке между торцом ударной трубы и точкой наблюдения происходит раньше, чем ОУВ проходит через данную точку, использование "нульмерной" модели может приводить к значительным ошибкам.

Также исследовалось поведение параметров течения после взаимодействия фронта воспламенения с ОУВ (точка B, рис.1). На рис.6 приводятся зависимости температуры от време-

ни за ОУВ (кривые 1 и 2) и на отражающем торце ударной трубы (3 и 4), рассчитанные для варианта 1. Цифрами 1 и 3 обозначены кривые, полученные на расчетной сетке с характерным размером ячейки $\Delta X = 1.5 \cdot 10^{-3}$ м, цифрами 2 и 4 – $\Delta X = 7 \cdot 10^{-4}$ м. Видно, что до момента В (рис.1) кривые 1 и 2 совпадают, а после него отличаются кардинальным образом. Данное отличие объясняется тем, что в случае 1 размер ячейки был больше характерного размера зоны воспламенения, а в случае 2 заведомо меньше. Поэтому, наблюдаемые в случае 1 пульсации параметров течения за ОУВ имеют чисто вычислительную природу и не имеют прямого отношения к пульсациям параметров, наблюдаемым в экспериментах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bowman C.T.* A shock-tube investigation of the high-temperature oxidation of methanol // Comb. and Flame. 1975, v.25, p.343.
2. *Волков В.А., Гидаспов В.Ю., Пирумов У.Г., Стрельцов В.Ю.* Численное моделирование течений реагирующих газокапельных и газовых смесей в экспериментах по воспламенению метанола//ТВТ. 1998, т.36, № 3, с.424.
3. *Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др.* Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Спр. – М.: Наука, 1979-1982.
4. *Волков В.А., Мусин В.Р., Пирумов У.Г. и др.* Численное моделирование процесса нейтрализации окиси углерода дозированным впрыском воды в высокотемпературную смесь продуктов сгорания // Изв. РАН МЖГ. 1993, №6, с.96.
5. *Westbrook C.K., Dryer F.L.* A Comprehensive mechanism for methanol oxidation // Comb. Sci. and Tech. 1979, v.20, p.125.