

Численное моделирование двумерных детонационных течений в газовзвесьях на основе схем с монотонизирующими операторами

Т.А. ХМЕЛЬ

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН
 khmel@itam.nsc.ru, 630090, Новосибирск, Институтская, 4/1

NUMERICAL MODELLING OF TWO-DIMENSIONAL DETONATION FLOWS IN GAS PARTICLE MIXTURES ON THE BASIS OF SCHEMES WITH MONOTONE OPERATORS

T.A. Khmel

Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SD RAS, Novosibirsk

Technologies of numerical simulation of shock wave and detonation processes in reacting gas particle mixtures, based on the use of schemes TVD, are discussed. The TVD scheme is combined with Gentry – Martin – Daly scheme for computations in non-equilibrium mixture and adapted to equilibrium models of heterogeneous media. Some examples of numerical simulations of two-dimensional flows of heterogeneous cellular detonation are presented.

Описание и методы расчета динамических процессов в газовзвесьях

Уравнения движения запыленных сред в рамках механики многоскоростного многотемпературного континуума вытекают из законов сохранения массы, импульса и энергии каждой из фаз и компонент [1, 2]. Для взвесей, не относящихся к порошкам насыпной плотности, объемом частиц и их взаимодействиями между собой можно пренебречь, тогда уравнения могут быть представлены в консервативном виде

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = \Gamma. \quad (1)$$

Здесь вектор решения, векторы потоков и вектор правых частей состоят из соответствующих векторов для компонент

$$W_i = \begin{pmatrix} \rho_i \\ \rho_i u_i \\ \rho_i v_i \\ \rho_i E_i \end{pmatrix}, \quad F_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 u_1 \\ p + \rho_1 u_1^2 \\ \rho_1 u_1 v_1 \\ \rho_1 u_1 E_1 + p u_1 \end{pmatrix}, \quad G_1 = \begin{pmatrix} \rho_1 v_1 \\ \rho_1 u_1 v_1 \\ p + \rho_1 v_1^2 \\ \rho_1 v_1 E_1 + p v_1 \end{pmatrix}, \quad F_i = \begin{pmatrix} \rho_i u_i \\ \rho_i u_i^2 \\ \rho_i u_i v_i \\ \rho_i u_i E_i \end{pmatrix}, \quad G_i = \begin{pmatrix} \rho_i v_i \\ \rho_i u_i v_i \\ \rho_i v_i^2 \\ \rho_i v_i E_i \end{pmatrix},$$

где ρ , p , E – плотность, давление и полная энергия, u, v , – компоненты скорости, Γ – вектор межфазного взаимодействия. Индексами обозначены: 1 – газовая (несущая) фаза, 2, ..., $N+1$ – дискретные компоненты (фракции частиц), N – число фракций.

Уравнения движения дополняются уравнениями состояния

$$p = (\gamma - 1)\rho_{11}[E_1 - (u_1^2 + v_1^2)/2], \quad E_1 = (u_1^2 + v_1^2)/2 + c_{v,1}T_1, \quad E_i = (u_i^2 + v_i^2)/2 + c_{v,i}T_i + Q$$

и соотношениями для процессов межфазного взаимодействия.

* Работа выполнена при частичной поддержке программ ОЭММПУ РАН «Фундаментальные проблемы горения и детонации в энергетике» и аналитической ведомственной целевой программы «Развитие научного потенциала высшей школы Министерства образования и науки» (код проекта 2.1.1/11316).

Начальные и граничные условия ставятся в соответствии с конкретными особенностями рассматриваемого класса задач.

Для исследования ударно-волновых и детонационных течений газозвесей методы численного расчета должны отвечать особенностям протекающих процессов (диспергирование, перемешивание и фазовые переходы, химические реакции, воспламенение и горение, наличие скачков и контактных разрывов) [3-12]. Численные алгоритмы должны воспроизводить особенности течения с достаточной точностью. Сверхзвуковой характер детонационных течений обуславливает успешное применение для расчета газовой фазы схем Годунова (распада разрыва) [3, 4] и схем с выделением скачка [5, 6]. В ряде работ схема Годунова успешно применялась для расчета и газовой, и дискретной фазы [7, 8]. При этом уравнения для газа и частиц записывались в дивергентном виде с давлением, пропорциональным объемной концентрации каждой из фаз, что допустимо в приближении разреженных газозвесей. Расчет обеих фаз с применением единого конечно-разностного метода проводился также в [9] (модифицированный метод крупных частиц, развитый в [10]), в [11, 12] (схема Мак-Кормака).

Развитые методы расчета сверхзвуковых течений газа неприменимы напрямую для уравнений системы (1) для дискретной фазы в силу их вырождения, обусловленного отсутствием членов, связанных с давлением. Приведение системы к нормальному виду невозможно, т.к. матрица Якоби имеет лишь два независимых собственных вектора и один присоединенный (т.е. не приводится к диагональному виду). Большинство авторов для решения уравнений дискретной фазы используют альтернативные схемы: метод крупных частиц [5, 6, 9, 10], схема Мак-Кормака [11, 12].

В последние десятилетия большое развитие получили конечно-разностные схемы, обладающие свойствами консервативности, транспортности и сохранения полной вариации. Схемы, основанные на применении монотонизирующих операторов (типа TVD), применялись для расчета газовой фазы в [13, 14]. В настоящей работе для расчета газовой фазы была принята схема [15]. В [15] представлены три различные версии схемы: ULT1, ULT2 и ULT1C. Версия ULT1C проявляет наилучшие свойства (в частности, при интегрировании волн разрежения) и применялась в одномерных задачах и ряде двумерных задач инициирования и распространения детонации в сопряжении с волной разрежения. Для некоторых двумерных расчетов применялась упрощенная версия ULT1, требующая меньше операций.

Для расчетов дискретной фазы первоначально была реализована широко применяемая в литературе схема Мак-Кормака, детальное описание которой приводится, например, в [16]. Основным принципом схемы заключается в последовательном чередовании разностей вперед и назад на четных и нечетных временных шагах. Недостатком в комбинации схем TVD – Мак-Кормака является то, что при оптимальных для схемы TVD числах Куранта схема Мак-Кормака проявляет признаки неустойчивости. Для преодоления этого вводились промежуточные временные шаги для фазы частиц, что снижало эффективность. В связи с этим рассмотрена альтернативная схема для частиц. Уравнение (1) для дискретной фазы можно преобразовать к виду

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial uW}{\partial x} + \frac{\partial vW}{\partial y} = \tilde{\Gamma}. \quad (2)$$

Каждое уравнение системы (2) идентично уравнению сохранения вихря в невязкой несжимаемой жидкости. Это позволяет для расчета динамики и тепловой истории частиц применить схему с разностями против потока Gentry – Martin – Daly, представленную в [16]. Двумерная реализация данной схемы (для части уравнений, отвечающих дискретной фазе) имеет следующий вид

$$\begin{aligned} W_{i,j}^{m+1} &= W_{i,j}^m - \lambda_x (u_{i+1/2,j}^m W_{i+1/2,j}^m - u_{i-1/2,j}^m W_{i-1/2,j}^m) \\ &\quad - \lambda_y (v_{i,j+1/2}^m W_{i,j+1/2}^m - v_{i,j-1/2}^m W_{i,j-1/2}^m) + \Delta t \Gamma_{i,j}^m, \\ u_{i+1/2,j}^m &= 0.5(u_{i,j}^m + u_{i+1,j}^m), \quad v_{i,j+1/2}^m = 0.5(v_{i,j}^m + v_{i,j+1}^m) \end{aligned} \quad (3)$$

$$W_{i+1/2,j}^m = \begin{cases} W_{i,j}^m, & u_{i+1/2,j}^m > 0 \\ W_{i+1,j}^m, & u_{i+1/2,j}^m < 0 \end{cases}, \quad W_{i,j+1/2}^m = \begin{cases} W_{i,j}^m, & v_{i,j+1/2}^m > 0 \\ W_{i,j+1}^m, & v_{i,j+1/2}^m < 0 \end{cases},$$

$$W_{i-1/2,j}^m = \begin{cases} W_{i-1,j}^m, & u_{i-1/2,j}^m > 0 \\ W_{i,j}^m, & u_{i-1/2,j}^m < 0 \end{cases}, \quad W_{i,j-1/2}^m = \begin{cases} W_{i,j-1}^m, & v_{i,j-1/2}^m > 0 \\ W_{i,j}^m, & v_{i,j-1/2}^m < 0 \end{cases}.$$

Схема (3) обладает свойствами консервативности и транспортности (переноса возмущений вдоль характеристик), а также обеспечивает второй порядок точности для конвективных членов [16]. Условие устойчивости схемы совпадает с условием схемы TVD (оптимальное число Куранта 0.95 в одномерных расчетах и 0.6 в двумерных). Схемы тестировались на задачах распространения и инициирования одномерной и двумерной детонации в газовзвесах частиц алюминия [17]. Результаты тестовых расчетов показали, что обе схемы обладают свойством сходимости, но на совпадающих сетках схема TVD + Gentry – Martin – Daly показывает меньшую погрешность, чем TVD + Мак-Кормака (рис. 1).

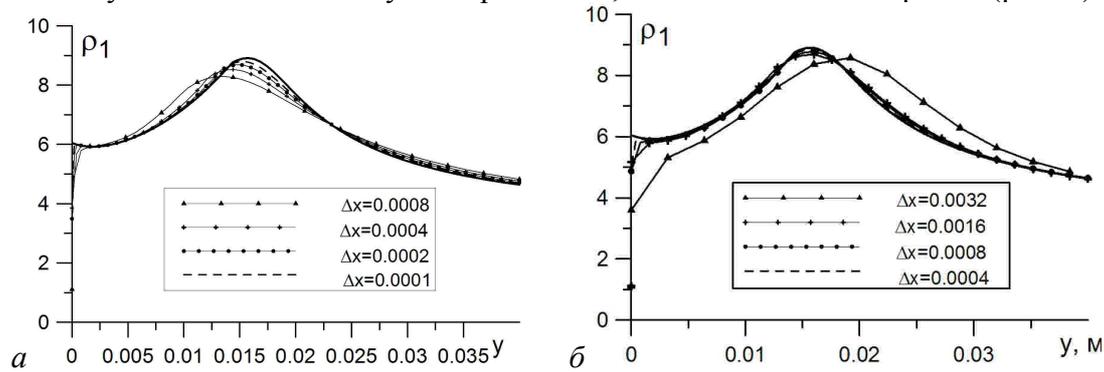


Рис. 1. Тестирование схем TVD +Мак-Кормака (а) и TVD+Gentry (б) на задаче о распространении плоской детонации в газовзвеси.

Монотонизирующие схемы для равновесных моделей механики

Применение схемы TVD для равновесных моделей механики многофазных сред требует внесения поправок, связанных с отличием определяющей системы уравнений от уравнений для газа системы (1). Отличия касаются скорости звука, собственных чисел и собственных векторов матрицы Якоби, матрицы перехода. Соответствующие поправки в схему TVD для односкоростной двухтемпературной/ однетемпературной модели механики газовзвесей получены с применением методологии, предложенной в [18] для построения схем расчета неидеальных газов. Следуя [18], уравнения состояния представляются в виде

$$p = p(\rho, \varepsilon), \quad \varepsilon = \rho e, \quad E = e + u^2 / 2. \quad \text{Введя величины } \chi = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{\varepsilon}, \quad \kappa = \left(\frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \right)_{\rho},$$

скорость звука в газе можно выразить как $c^2 = \chi + \kappa h$, $h = H - u^2 / 2 = e + p / \rho$ (для идеального газа $\chi = 0$, $\kappa = \gamma - 1$). Применительно к уравнениям для газовзвеси замороженная скорость звука (скорость распространения малых возмущений) определяется в равновесной по скоростям и неравновесной по температурам смеси как $c_f^2 = (\gamma_1 - 1)[h - \xi(c_{v2}T_2 + Q)]$, $\gamma_1 = 1 + R / c_{v1}$, то есть $\chi = -(\gamma_1 - 1)\xi(c_{v2}T_2 + Q)$, $\kappa = \gamma_1 - 1$. Матрица Якоби имеет вид

$$A = \frac{\partial F}{\partial W} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \chi - (2 - \kappa) \frac{u^2}{2} & (2 - \kappa)u & \kappa \\ \left(\chi - \frac{\kappa u^2}{2} - H \right)u & H - \kappa u^2 & (1 + \kappa)u \end{pmatrix}.$$

Соответствующие поправки в схему TVD [15] получены на основе определения матрицы правых собственных векторов A для равновесной взвеси. Результаты тестирования схемы с поправками представлены в [19].

Одним из способов повышения эффективности численных расчетов является использование многопроцессорных вычислительных комплексов. Основной принцип, принятый за основу для распараллеливания двумерных задач распространения детонационных волн в трубах (каналах) и формирования ячеистой детонации, вытекает из особенности процесса. Она состоит в том, что продольный размер области в несколько раз (на порядок) превышает поперечный. Поэтому здесь целесообразно применить линейную декомпозицию области (по координате x), и проводить расчет каждой из подобластей на отдельном процессоре (рис. 2). Размерность массивов при этом ограничивается числом точек, обрабатываемым данным процессором.

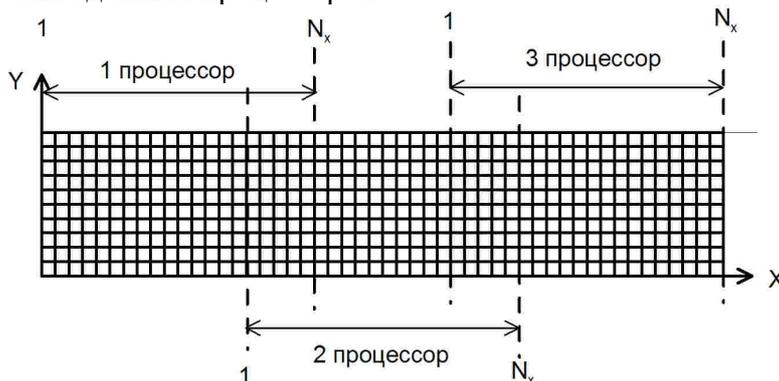


Рис. 2. Схема декомпозиции области при распараллеливании расчетов распространения детонации в каналах.

Расчет на каждом шаге по времени одинаков на всех процессорах, также совпадают граничные условия на стенках ($y = 0$) и ($y = Y$). Обмен между процессорами проводится на каждом шаге по времени. В силу пятиточечного шаблона схемы TVD обмен данных для газовой фазы происходит по четырем колонкам точек. Для дискретной фазы достаточно обмена по двум колонкам теневого точек. Результаты расчетов записываются в файлы данных, имена которых определяются номером процессора m , а их последующая сборка с исключением дублирования теневого точек проводится на ПЭВМ. Программные модули написаны на языке ФОРТРАН с использованием библиотеки MPI [20]. Расчет проводился на многопроцессорном комплексе МВС-1000 ИТПМ СО РАН. Для оценки эффективности алгоритма решалась одна и та же задача на различном числе процессоров. В среднем время счета на n_p процессорах составляет $T = T_1 / n_p$, где T_1 - время счета на одном процессоре. Таким образом, эффективность пропорциональна числу используемых процессоров МВС.

Численное моделирование двумерных детонационных течений

В газах и газовзвесьях наблюдается режим распространения в форме ячеистой детонации: на фронте развивается регулярная система поперечных волн, а течение и траектории тройных точек характеризуются ячеистой структурой. Формирование и распространение ячеистой детонации моделируется на ми в двумерных расчетах задачи ударно-волнового инициирования плоской волны детонации в плоском канале, полностью или на часть ширины заполненном взвесью частиц алюминия в кислороде. Для инициации поперечных волн задавалось малое локальное возмущение плотности частиц. На рис. 3 показаны типичные картины мгновенного поля течения развитой ячеистой детонации в полностью заполненном взвесью канале, а на рис. 4 - картины максимального давления $p_{\max}(x, y) = \max_t[p(x, y, t)]$, выявляющие траектории тройных точек ячеистой детонации. Как видно на рис. 4, поперечные волны развиваются постепенно и проявляются лишь после прохождения фронтом участка $x=0.3$ м.

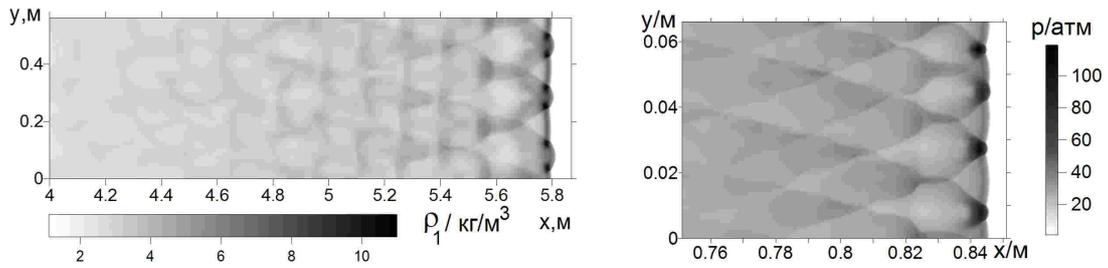


Рис. 3. Типичные мгновенные картины течений ячейистой детонации.

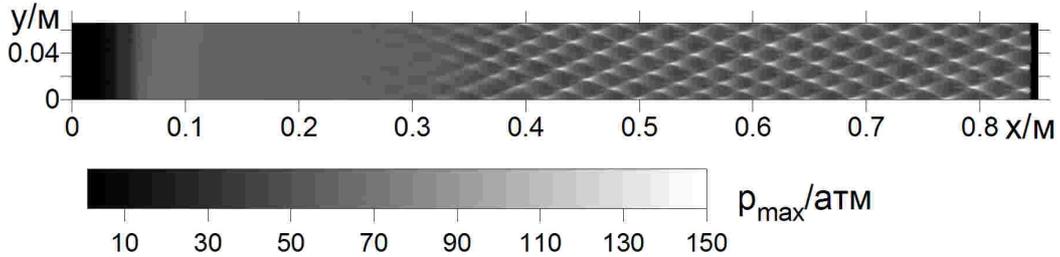


Рис. 4. Траектории тройных точек при формировании ячейистой детонации.

Ячеисто-подобные течения формируются и в случае, когда взрыв занимает только часть ширины канала (рис. 5). Распространение комбинированного ударного/детонационного фронта в облаке со свободной границей характеризуется флуктуациями, обусловленными прохождением и отражением от стенок и границы облака поперечной волны. При этом на кромке облака продуктов детонации, содержащего также несгоревшие частицы, развивается неустойчивость Кельвина-Гельмгольца, проявляющаяся в формировании характерных «язычков» на поверхности раздела фаз (рис. 4,б). Эта неустойчивость обусловлена различием скоростей в газе за ударной волной вне слоя и в смеси продуктов детонации и несгоревших частиц за детонационной волной.

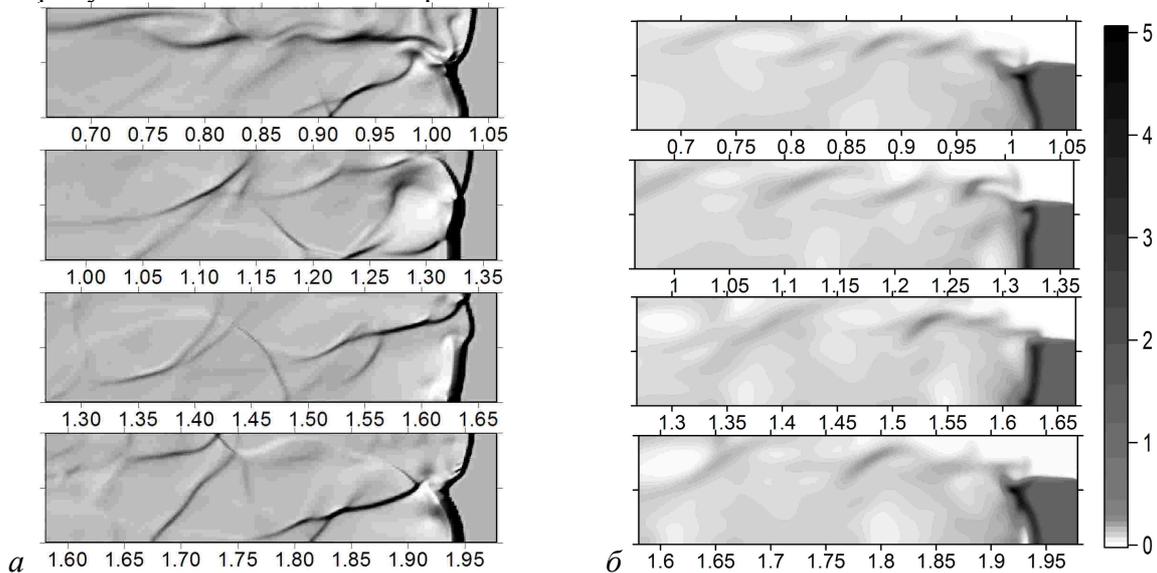


Рис. 5. Распространение ячеисто-подобной детонации в ограниченном облаке частиц в канале: градиентное поле давления (а), поле плотности частиц (б), $\Delta t = 0.2$ мс.

Таким образом, на примерах двумерных течений ячейистой детонации показано, что применение монотонизирующих операторов позволяет исключить численные неустойчивости на фронтах ударных и детонационных волн, однако не препятствует воспроизведению в численном моделировании развития присущей процессам физической неустойчивости.

Список литературы

1. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч.1,2. М.: Наука. 1987.
2. Яненко Н.Н., Солоухин Р.И., Папырин А.Н., Фомин В.М. Сверхзвуковые двухфазные течения в условиях скоростной неравновесности частиц. Н.: Наука. 1980. 160 с.
3. Афанасьева Е.А., Левин В.А. Воспламенение и горение частиц алюминия за ударными и детонационными волнами // ФГВ. 1987. Т. 23. № 1. С. 8-14.
4. Smirnov N.N., Nikitin V.F., Legros J.C. Ignition and combustion of turbulized dust-air mixtures // Combustion and Flame. 2000. V.123. №1-2. P.46-67.
5. Коробейников В.П., Марков В.В., Сизых Г.Б. Численное решение двумерных нестационарных задач о движении горючей пылегазовой смеси // Докл. АН СССР. 1991. Т. 316. №5. С.1077-1081.
6. Ждан С.А., Прохоров Е.С. Детонация взвеси частиц гексогена, частично заполняющей цилиндрический канал // ФГВ. 1999. Т.35. №4. С.79-87.
7. Benkiewicz K., Hayashi A.K. Two-dimensional numerical simulations of multi-headed detonations in oxygen-aluminum mixtures using an adaptive mesh refinement // Shock Waves. 2003. V. 13. P. 385-402.
8. Fangrat J., Glinka W., Wolanski P., Wolinski M. Detonation structure in organic dust-oxygen mixtures// Arch. Combust. 1987. V. 7. No 3/4. P. 321-332.
9. Ивандаев А.И., Кутушев А.Г., Родионов С.П. Математическое моделирование ударно-волновых процессов в химически-инертных и реагирующих полидисперсных смесях газа с твердыми частицами // Математическое моделирование. 1995. Т.7. №12. С.19-32.
10. Губайдуллин А.А., Ивандаев А.И., Нигматуллин Р.И. Модифицированный метод «крупных частиц» для расчета нестационарных волновых процессов в многофазных дисперсных средах // ЖВММФ. 1977. Т.17. №6. С.1531-1544.
11. Veysiere B., Khasainov B.A, Arfi P. Investigation of the detonation regimes in gaseous mixtures with suspended starch particles // Shock Waves. 1999. V.9. №3. P.165-172.
12. Veysiere B., Bozier O., Khasainov B.A. Effect of a suspension of magnesium particles on the detonation characteristics of methane-oxygen-nitrogen mixtures at elevated initial pressures // Shock Waves. 2002. V.12. №3. P.227-233.
13. Chang E.J., Kailasanath K. Shock wave interactions with particles and liquid fuel droplets // Shock Waves. 2003. V.12. №4. P. 333-341.
14. Park J.S., Baek S.W. Interaction of a moving shock wave with a two-phase reacting medium // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2003. V. 46. № 24. P. 4717-4732.
15. Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // J. Comp. Phys. 1983. V.49. №3. P.357-393.
16. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир. 1980. 616 с.
17. Хмель Т.А. Численное моделирование двумерных детонационных течений в газозвеси реагирующих твердых частиц // Мат. моделирование. 2004. Т.16. №6. С.73-77.
18. Montagne J.L., Yee H.C., Vinokur M. Comparative study of high-resolution shock-capturing schemes for a real gas // AIAA Journal. 1989. V. 27. № 10. P. 1332-1346.
19. Федоров А.В., Хмель Т.А. Численные технологии исследования гетерогенной детонации газозвесей // Мат. моделирование. 2006. Т.18. №8. С.49-63.
20. Шпаковский Г.И., Серикова Н.В. Программирование для многопроцессорных систем в стандарте MPI. Минск: БГУ, 2002. 323 с.