

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ГАЗОВОГО ВЗРЫВА В НЕВЕНТИЛИРУЕМОМ СОСУДЕ МЕТОДОМ КРУПНЫХ ВИХРЕЙ

Д. В. Макаров, В. В. Мольков

Institute of Fire Safety Engineering Research and Technology (FireSERT), University of Ulster, BT37 0QB, Belfast, UK, v.molkov@ulster.ac.uk

Разработана модель динамики газового взрыва в невентилируемом сосуде, и приведены результаты расчета горения начально-неподвижной стехиометрической водородовоздушной смеси в сферическом сосуде объемом  $6,37 \text{ м}^3$ . Модель основана на использовании метода крупных вихрей для моделирования турбулентности и градиентного метода моделирования горения предварительно перемешанных реагентов. Предложен метод для снижения расчетной толщины фронта пламени, обсуждаются результаты его применения. Для достижения вычислительной эффективности использовалась процедура адаптации расчетной сетки к решению задачи. Расчетная динамика давления хорошо совпадает с опубликованными экспериментальными данными, а скорость фронта пламени — с результатами расчета по модели сосредоточенных параметров для того же эксперимента.

Ключевые слова: газовый взрыв, метод крупных вихрей, водород, горение.

### ВВЕДЕНИЕ

Методы вычислительной гидродинамики являются на сегодняшний день наиболее информативным подходом к изучению и решению фундаментальных и практических задач в области горения. Тенденция к более широкому их использованию поддерживается быстро растущей производительностью современной вычислительной техники. С другой стороны, практическое применение этих методов к решению задач динамики реагирующих сред требует верификации моделей в сравнении с экспериментальными данными [1], что актуально, в частности, при анализе задач пожаро- и взрывобезопасности [2]. Количество работ, в которых трехмерные численные расчеты газовых взрывов сравниваются с экспериментальными результатами, чрезвычайно ограничено. Это в полной мере относится к «простым» случаям, каковым является выбранное в настоящей работе распространение пламени в сферическом сосуде от расположенного в центре точечного источника зажигания. Данное исследование начинается серию работ по отработке универсальной модели крупных вихрей и ее валидации относительно различных экспериментов, включая «вентилируемые взрывы» при наличии препятствий внутри сосудов сложной формы и т. п.

При решении задач взрывобезопасности до настоящего времени широко применяются мо-

дели сосредоточенных параметров, которые не требуют больших вычислительных затрат и валидированы относительно больших массивов экспериментальных данных. Такие модели позволяют с высокой точностью решать задачи о динамике горения перемешанной смеси в ряде случаев, в частности для замкнутых сосудов сферической формы и полых сосудов со сбросными отверстиями (при отношении длины к диаметру не более 3 : 1). При этом результаты расчетов для таких случаев по ранее валидированным моделям сосредоточенных параметров (МСП) могли бы быть использованы для верификации численных расчетов по моделям вычислительной гидродинамики [2]. Будучи одномерными по математической формулировке, МСП имеют существенные ограничения по сравнению с трехмерными методами вычислительной гидродинамики при описании динамики газовых взрывов. К числу «естественных» ограничений одномерного подхода относятся случаи расчета взрыва в помещениях со сложной геометрией, в сосудах с большим отношением длины к диаметру, с внутренними препятствиями и т. п. Одномерные феноменологические модели не могут быть признаны пригодными для воспроизведения динамики взрыва в смежных сосудах или серии сосудов. Из-за предположения об одномерности давления по пространству с помощью этих моделей невозможно моделировать переходные процессы горения, такие, например, как переход де-

флагакции в детонацию. Практически невозможно использовать одномерные модели при описании динамического взаимодействия внутренних взрывов с внешними, возникающими в результате истечения свежей смеси через проем в помещении и последующего ее зажигания в атмосфере. Ограничено использование одномерных моделей и для описания теплотерь в стенке сосуда, так как такие модели не идентифицируют реальное положение фронта пламени относительно стенок и препятствий в любом помещении, и особенно в помещениях сложной геометрии. Приведенные примеры ограничений МСП не исчерпывают их полный перечень.

Исследования в области численного трехмерного моделирования горения газовых смесей методами вычислительной гидродинамики выявили сложности, связанные, в частности, с точностью расчета ламинарного и переходного режимов распространения пламени в начально-неподвижной смеси [3] и моделирования взаимодействия процессов горения и турбулентности [4]. Согласно известным представлениям (см., например, [5]) характер распространения сферического фронта пламени в начально-неподвижной смеси и его структура изменяются с радиусом пламени. В зависимости от типа горючего и состава смеси пламя остается ламинарным до размера порядка сантиметров. Процесс селективной диффузии или диффузионно-тепловая неустойчивость влияют на «тонкую» структуру пламени, делая его негладким, с характерным размером возмущений порядка реальной толщины фронта пламени. Тонкая структура пламени не может быть разрешена численными методами, когда рассматриваемые в задаче линейные размеры значительно превосходят реальную толщину фронта пламени, что имеет место в случае газовых взрывов с размером от нескольких до сотен метров. Влияние этого фактора на динамику взрыва можно моделировать через значение нормальной скорости пламени. Далее в соответствии с экспериментальными данными при размерах порядка сантиметров возникает ячеистая структура пламени, обусловленная гидродинамической неустойчивостью. Широкий спектр волн возмущения на поверхности пламени (от нескольких сантиметров до размера текущего радиуса пламени) формирует фрактальную структуру фронта горения [5]. Развитие ячеистой структуры с изменени-

ем размера пламени может приводить к развитию ускоряющегося самотурбулизирующегося режима распространения горения при больших размерах поверхности пламени. При этом ускорение горения происходит из-за прогрессирующего увеличения поверхности ячеистого фронта пламени.

Точность описания взаимодействия процессов горения и турбулентности зависит от выбора модели турбулентности [4] и метода моделирования фронта пламени. Метод крупных вихрей (МКВ) является наиболее перспективным подходом к описанию динамики течения турбулентных реагирующих потоков, поскольку он обеспечивает мгновенные значения зависимых переменных в контрольных объемах расчетной сетки, позволяя точнее моделировать взаимодействие процессов турбулентного переноса и горения [6–8]. Однако при этом возникает проблема уменьшения расчетной толщины фронта пламени, так как использование широкого расчетного фронта отрицательно влияет на точность моделирования динамики процесса горения [8]. В частности, в соответствии с результатами предыдущих исследований для устойчивости численного решения рекомендована расчетная толщина фронта пламени порядка 4 контрольных объемов гексагональной расчетной сетки [9]. Это значение, вероятно, будет несколько ниже для неструктурированной тетраэдральной сетки. Исходя из этого можно предположить, что ячейки реального фронта пламени размером больше линейного размера  $5 \div 10$  контрольных объемов (2–3 толщины расчетного фронта пламени) будут разрешаться непосредственно МКВ. Важное практическое значение имеет изучение пределов применимости МКВ к решению крупномасштабных задач, что может быть прояснено только при сравнении с экспериментальными данными.

Цель настоящей работы — разработка модели МКВ для расчета динамики газовых взрывов в крупномасштабных закрытых сооружениях и ее верификация на примере горения начально-неподвижной водородовоздушной смеси стехиометрического состава в сферическом сосуде объемом  $6,37 \text{ м}^3$  с расположенным в его центре источником зажигания. Выбор задачи с горением водорода в качестве примера для верификации модели обусловлен актуальностью проблемы использования водорода в качестве альтернативного энергоносителя в бли-

жайшем будущем.

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

### Вывод определяющей системы уравнений

Для того чтобы получить уравнения, используемые в МКВ, необходимо выполнить операцию фильтрации следующей системы трехмерных уравнений неразрывности, движения и энергии для сжимаемой ньютоновской жидкости:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \tau_{ij} + \rho g_i, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j (\rho E + p)) = \\ & = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( -J_{jE} - \sum_m h_m J_{jm} + u_i \tau_{ij} \right) + S_E. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $\rho$  — плотность,  $\rho = pM/R_\mu T$ , где  $M$  — молекулярная масса,  $p$  — давление,  $R_\mu$  — универсальная газовая постоянная,  $T$  — температура;  $t$  — время;  $u_j$  — компонента вектора скорости;  $x$  — пространственная координата;  $\tau_{ij}$  — тензор напряжений;  $g$  — ускорение силы тяжести;  $E$  — полная энергия,  $E = h - p/\rho + u^2/2$ , где  $h$  — энтальпия,  $u$  — скорость;  $J_{jE}$  — тепловой поток в  $j$ -м направлении,  $J_{jE} = -\left(\frac{\mu c_p}{\text{Pr}}\right) \frac{\partial T}{\partial x_j}$ , где  $\mu$  — динамическая вязкость,  $c_p$  — удельная теплоемкость при постоянном давлении,  $\text{Pr}$  — число Прандтля,  $\text{Pr} = \mu c_p/k$ ,  $k$  — коэффициент теплопроводности;  $J_{jm}$  — диффузионный поток  $m$ -го компонента в  $j$ -м направлении,  $J_{jm} = -\left(\frac{\mu}{\text{Sc}}\right) \frac{\partial Y_m}{\partial x_j}$ , где  $\text{Sc}$  — число Шмидта,  $\text{Sc} = \mu/\rho D$ ,  $D$  — коэффициент диффузии,  $Y_m$  — массовая концентрация  $m$ -го компонента газовой смеси;  $S_E$  — источник член в уравнении сохранения энергии; индексы  $i, j, k$  относятся к пространственным координатам,  $m$  — к компоненту газовой смеси.

Используемые в МКВ фильтрованные (обозначены чертой сверху) и фильтрованные

с осреднением по массе (обозначены тильдой) переменные вводятся аналогично [7]:

$$\bar{\varphi}(x, t) = \int_V \varphi(y, t) G(x, y) d^3 y, \quad (4)$$

$$\bar{\rho}(x, t) \tilde{\varphi}(x, t) = \int_V \rho(y, t) \varphi(y, t) G(x, y) d^3 y. \quad (5)$$

При помощи операций фильтрации (4), (5) зависимая функция  $\varphi(x, t)$  разлагается на составляющие — фильтрованную (пространственно разрешаемую в расчетах)  $\bar{\varphi}$ ,  $\tilde{\varphi}$  и подсеточную (неразрешаемую и требующую моделирования)  $\varphi'$ ,  $\varphi''$ :  $\varphi = \bar{\varphi} + \varphi'$  и  $\varphi = \tilde{\varphi} + \varphi''$ . В настоящей работе оператор фильтрации неявно представлен контрольно-объемным методом дискретизации:  $G(x, y) = 1/V_{CV}$ , если  $y \in V_{CV}$  и  $G(x, y) = 0$  во всем остальном пространстве ( $V_{CV}$  — объем ячейки расчетной сетки). Фильтрация уравнений (1)–(3) приводит к следующей системе:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij}) - \\ & - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j u_i} - \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i) + \bar{\rho} g_i, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{E}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{u}_j (\bar{\rho} \tilde{E} + \bar{p})) = \\ & = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( -\bar{J}_{jE} - \sum_m \overline{h_m J_{jm}} + \overline{u_i \tau_{ij}} \right) - \\ & - \frac{\partial}{\partial x_j} ((\overline{\rho u_j E} - \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{E}) + (\overline{u_j p} - \tilde{u}_j \bar{p})) + \bar{S}_E. \end{aligned} \quad (8)$$

Неразрешенные турбулентные напряжения  $\tau_{ij,SGS} = -(\overline{\rho u_j u_i} - \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i)$  моделируются аналогично моделям для не реагирующих потоков [7, 8]:

$$\tau_{ij,SGS} = 2\mu_t \tilde{S}_{ij} = \mu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right),$$

где  $\tilde{S}_{ij}$  — тензор скоростей деформаций; индекс  $t$  относится к турбулентным величинам,

$SGS$  — к подсеточным значениям. Поскольку связанный с объемным расширением член  $-2/3[\mu(\partial u_k/\partial x_k)]\delta_{ij}$  ( $\delta_{ij}$  — символ Кронекера) мал по сравнению с турбулентными напряжениями в районе фронта пламени и практически равен нулю за его пределами, его влияние не учитывалось. Кроме того, для крупномасштабных задач объемное расширение происходит в численно утолщенном фронте, где моделируемые процессы могут быть неадекватны физическим. Тензор эффективных напряжений, включающий ламинарные и подсеточные турбулентные напряжения, равен

$$\begin{aligned}\bar{\tau}_{ij,eff} &= \bar{\tau}_{ij} + \tau_{ij,SGS} = 2(\mu + \mu_t)\tilde{S}_{ij} = \\ &= 2\mu_{eff}\tilde{S}_{ij} = \mu_{eff}\left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i}\right).\end{aligned}$$

Молекулярный и подсеточный турбулентный тепловые потоки выражены аналогичным образом:

$$\bar{J}_{iE,eff} = \bar{J}_{jE} + J_{jE,SGS} = -\frac{\mu_{eff}c_p}{Pr_{eff}}\frac{\partial\tilde{T}}{\partial x_j}.$$

Члены  $-\sum_m \overline{\tilde{h}_m J_{jm}}$  и  $\overline{u_i \tau_{ij}}$  связаны с тепловым потоком за счет диффузии компонентов и вязкостного трения и моделируются в предположении

$$\begin{aligned}-\sum_m \overline{\tilde{h}_m J_{jm}} &= -\sum_m \tilde{h}_m \tilde{J}_{j m,eff} = \\ &= -\sum_m \tilde{h}_m \left(-\frac{\mu_{eff}}{Sc_{eff}}\frac{\partial\tilde{Y}_m}{\partial x_j}\right),\end{aligned}$$

$$\overline{u_i \tau_{ij}} = \tilde{u}_i \bar{\tau}_{ij,eff} = \tilde{u}_i \mu_{eff} \left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i}\right).$$

В итоге система уравнений (6)–(8) преобразуется к следующему виду:

$$\frac{\partial\bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j) = 0, \quad (9)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial\bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{u}_i) &= -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu_{eff}\left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i}\right)\right) + \bar{\rho}g_i, \quad (10)\end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{E}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tilde{u}_j(\bar{\rho}\tilde{E} + \bar{p})) =$$

$$\begin{aligned}&= \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_{eff}c_p}{Pr_{eff}}\frac{\partial\tilde{T}}{\partial x_j} - \sum_m \tilde{h}_m\left(-\frac{\mu_{eff}}{Sc_{eff}}\frac{\partial\tilde{Y}_m}{\partial x_j}\right) + \right. \\ &\quad \left. + \tilde{u}_i\mu_{eff}\left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i}\right)\right) + \bar{S}_E. \quad (11)\end{aligned}$$

Источниковый член в уравнении сохранения энергии связан со скоростью химической реакции во фронте пламени и будет рассмотрен в следующем параграфе.

Эффективная вязкость  $\mu_{eff}$  рассчитывается согласно теории ренормализации [10], которая может применяться как для ламинарных, так и турбулентных режимов течения:

$$\mu_{eff} = \mu\left[1 + H\left(\frac{\mu_s^2\mu_{eff}}{\mu^3} - 100\right)\right]^{1/3},$$

где  $\mu_s = \bar{\rho}(0,157V_{CV}^{1/3})^2\sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}$ ,  $H(x)$  — функция Хэвисайда.

Молекулярное число Прандтля принято равным  $Pr = 0,7$ . Для расчета эффективно-го числа Прандтля использовалось выражение, полученное из теории ренормализации [10] для не реагирующих потоков:

$$\begin{aligned}&\left|\frac{1/Pr_{eff} - 1,3926}{1/Pr - 1,3929}\right|^{0,6321} \times \\ &\times \left|\frac{1/Pr_{eff} + 2,3929}{1/Pr + 2,3929}\right|^{0,3679} = \frac{\mu}{\mu_{eff}}. \quad (12)\end{aligned}$$

### Модель горения

В предположении глобальной одноступенчатой реакции состав смеси удобно описывать уравнением для степени развития реакции (относительная или нормализованная концентрация продуктов горения) [11]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j c) = \frac{\partial}{\partial x_j}(-J_{jc}) + S_c, \quad (13)$$

где  $c$  — степень развития реакции (относительная массовая концентрация продуктов горения),  $c = 0$  в свежей смеси и  $c = 1$  в продуктах горения,  $J_{jc}$  — диффузионный поток,  $S_c$  — источниковый член.

В режиме моделирования горения, когда турбулентный фронт пламени рассматривается как совокупность ламинарных пламен, влияние химической кинетики на процессы горения целиком описывается нормальной скоростью горения  $S_u$  [4] и взаимодействие процессов горения и турбулентности чисто кинематическое. Предлагаемые до сих пор подходы к моделированию процессов горения обладают значительным сходством [12], и массовая скорость химической реакции может быть описана, в частности, при помощи метода, сходного с градиентным методом моделирования горения [13],  $S_c = \rho_u S_u |\text{grad} \tilde{c}|$  (индексом  $u$  обозначены параметры, относящиеся к свежей смеси). Градиентный метод позволяет обеспечить заданную массовую скорость реакции, так как интеграл градиента степени развития реакции по нормали к фронту пламени равен единице. Кроме того, данный метод не требует специальных расчетных процедур для моделирования движения фронта пламени.

В МКВ увеличение поверхности фронта пламени в ходе горения отчасти напрямую разрешается в вычислениях. Влияние не разрешенной численно ячеистой структуры фронта должно моделироваться с помощью подсеточного фактора турбулентности  $\Xi_{SGS}$ , который следует использовать как множитель к нормальной скорости горения. Очевидно, что чем меньше размер контрольного объема используемой расчетной сетки, тем большая часть ячеистой структуры разрешима напрямую в вычислениях и тем меньше подсеточный фактор турбулентности. В пределе достаточно малого размера контрольного объема имеем  $\Xi_{SGS} = 1$ .

После применения к уравнению (13) операции фильтрации и введения модельного выражения для молекулярного и подсеточного диффузионных потоков

$$\begin{aligned} \bar{J}_{jc} + J_{jc,SGS} &= -\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j} + (\overline{\rho u_j \tilde{c}} - \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{c}) = \\ &= -\frac{\mu_{eff}}{Sc_{eff}} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j} \end{aligned}$$

уравнение для степени развития реакции приобретает следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{c}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{c}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu_{eff}}{Sc_{eff}} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j} \right) + \bar{S}_c. \quad (14)$$

В расчетах молекулярное число Шмидта принималось равным  $Sc = 0,7$ , а эффективное

число Шмидта рассчитывалось аналогично эффективному числу Прандтля по формуле (12). Модельное выражение для источникового члена в уравнении степени развития реакции записано в пренебрежении разницей между простой фильтрацией и фильтрацией по Фавру с учетом подсеточного фактора турбулентности (аналогично [14]):

$$\bar{S}_c = \rho_u S_u |\text{grad} \tilde{c}| \Xi_{SGS}.$$

В дальнейшем надбуквенные символы фильтрации — черту и тильду — будем опускать, предполагая фильтрацию с осреднением по массе для всех переменных, кроме плотности и давления.

Для уменьшения расчетной толщины фронта пламени предлагается следующая модификация градиентного метода и связанного с ним источникового члена в уравнениях для степени развития реакции и энергии:

$$S_c = \rho_u S_u |\text{grad} c^N| \Xi_{SGS}, \quad (15)$$

$$S_c = H_c S_c = H_c \rho_u S_u |\text{grad} c^N| \Xi_{SGS}, \quad (16)$$

где  $N$  определяется из соображений контроля расчетной толщины фронта. Данный подход позволяет уменьшить расчетную толщину фронта пламени за счет более быстрого изменения  $c$  при сохранении массовой скорости горения, так как теоретически интеграл функции  $\text{grad} c^N$  по толщине фронта пламени равен единице вне зависимости от значения  $N$ . При выборе коэффициента необходимо иметь в виду, что его высокое значение может привести к неприемлемо тонкому для применения градиентного метода фронту пламени и неустойчивому численному решению. В настоящей работе проведены расчеты и сравнение результатов для вариантов  $N = 1$  (стандартный метод [13]) и  $N = 2$  (модифицированный градиентный метод). Во всех расчетах подсеточный фактор турбулентности принимался равным  $\Xi_{SGS} = 1$ , так как моделируемая смесь была начально-неподвижна, а имеющиеся данные о размерах ячеек крупномасштабных дефлаграционных пламен [15] ( $15 \div 45$  см при размере пламени  $1 \div 3$  м) указывают на достаточно малый размер контрольного объема использованной в данной работе расчетной сетки.

В настоящей работе моделировались условия эксперимента [16], где исследовалось горение водородовоздушной смеси стехиометрического состава (29,5 % водорода по объему) в сферическом сосуде объемом 6,37 м<sup>3</sup> (диаметр сферы 2,3 м) с центральным зажиганием. Начальное давление и температура в сосуде составляли 97 кПа и 373 К соответственно. Зависимость нормальной скорости распространения пламени по смеси от давления и температуры находили методом обратной задачи [17] в предположении адиабатичности процесса сжатия и в результате обработки того же эксперимента [16] в форме  $S_u = S_{u0}(p/p_0)^\varepsilon$ . Было получено значение скорости горения при начальных условиях  $S_{u0} = 4,15 \text{ м}\cdot\text{с}^{-1}$  и значение обобщенного термокинетического показателя  $\varepsilon = 1,0$ . Следует сразу оговориться, что полученные таким образом значения  $S_{ui}$  и  $\varepsilon$  учитывают как тонкую структуру водородовоздушного пламени, обусловленную селективной диффузией, так и ячеистую структуру, вызванную развитием гидродинамической неустойчивости. Поскольку ячеистая структура будет разрешена в расчетах, по крайней мере частично, это означает, что ее влияние на ускорение горения учитывается дважды. Поэтому следует ожидать, что расчетная динамика взрыва будет опережать экспериментальную при примененных значениях  $S_{ui}$  и  $\varepsilon$ . К сожалению, других источников для определения  $S_{ui}$  и  $\varepsilon$  при такой начальной температуре горения стехиометрической водородовоздушной смеси найти не удалось.

Состав продуктов горения определен термодинамическим расчетом [18] в изобарических условиях (учитывалось 21 химическое соединение). Теплота реакции, соответствующая данному процессу, рассчитывалась как разница внутренних энергий свежей смеси ( $e_u$ ) и продуктов горения ( $e_b$ ) при начальной температуре:  $H_c = (e_u - e_b)|_{T_0=373 \text{ К}} = 2,92 \times 10^6 \text{ Дж}\cdot\text{кг}^{-1}$ . Теплоемкость свежей смеси и продуктов горения аппроксимировалась полиномами пятой степени как функция температуры. Молекулярная вязкость свежей смеси и продуктов горения аппроксимировалась формулой Сазерленда для воздуха. В численных расчетах состав продуктов горения не зависел от температуры и давления и считался постоянным в течение всего процесса горения.

Для решения системы уравнений (9)–(11), (14) использовался программный комплекс

FLUENT, реализующий контрольно-объемный вариант метода конечных разностей. Для аппроксимации конвективных членов применялась противопоточная схема второго порядка точности, центрально-разностная аппроксимация для диффузионных членов, явная схема для аппроксимации по времени и метод Рунге — Кутты для решения системы уравнений. Величина шага по времени определялась из условия устойчивости Куранта — Фридрихса — Леви ( $CFL$ ):  $\Delta t = (CFL \cdot \Delta)/(a + u)$ , где  $\Delta$  — характерный размер контрольного объема,  $a$  — скорость звука. Для обеспечения устойчивости процесса решения принималось  $CFL = 0,8$ .

Для дискретизации сферической расчетной области использовалась тетраэдральная неструктурированная расчетная сетка с  $\Delta = 0,07 \text{ м}$  (порядка 33 контрольных объемов вдоль диаметра сферы). Для экономии вычислительных ресурсов использовалась адаптация расчетной сетки (один уровень). Характерный линейный размер адаптированного контрольного объема составлял  $\Delta = 0,035 \text{ м}$ . Критерием для адаптации служило значение  $c = 0,001$ , для разадаптации — комбинированное условие  $c \geq 0,9$  и  $S_c \leq 10$ . Число контрольных объемов при решении задачи варьировалось от 116586 (без адаптации) до 306000 (с адаптацией). Неадаптированная расчетная сетка с постоянным размером  $\Delta = 0,035 \text{ м}$  насчитывала бы порядка 1 млн контрольных объемов, что привело бы к неоправданно высоким затратам вычислительных ресурсов.

В начальный момент времени смесь считалась неподвижной,  $u = 0$ . Горение инициировалось в центре сферы с использованием значения  $c = 1,0$  в области радиусом  $R \leq 0,04 \text{ м}$ . Для обеспечения численной устойчивости применялось плавное распределение  $c = \exp[-(R - 0,04)^2/0,08^2]$  за пределами этой области. Поле температур в начальный момент задавалось в виде  $T = T_{u0} + c(T_{b0} - T_{u0})$ , где  $T_{u0} = 373 \text{ К}$ ,  $T_{b0} = 2280 \text{ К}$ . В качестве граничных условий на стенке ставились условия отсутствия скольжения для уравнений динамики ( $u = 0$ ), адиабатические граничные условия для уравнения энергии ( $\partial T/\partial n = 0$ ) и условия непроницаемости для уравнения степени развития реакции ( $\partial c/\partial n = 0$ ).

В настоящей работе анализируются результаты четырех вариантов расчета с различными сетками и показателями степени  $N$  в градиентной части источникового члена в уравне-

ниях (15), (16):

вариант 1:  $N = 1$ , сетка без адаптации,  
 $\Delta = 0,07$  м,

вариант 2:  $N = 1$ , сетка с адаптацией,  $\Delta =$   
 $0,035$  м,

вариант 3:  $N = 2$ , сетка без адаптации,  
 $\Delta = 0,07$  м,

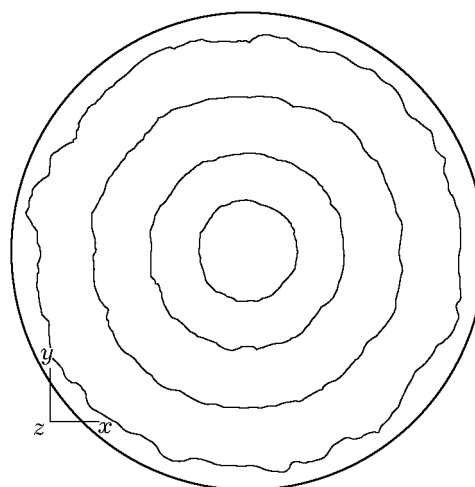


Рис. 1. Профиль фронта пламени в поперечном сечении в различные моменты времени: вариант расчета 4,  $t = 9,8; 20,1; 32,7; 44,4$  мс

вариант 4:  $N = 2$ , сетка с адаптацией,  $\Delta =$   
 $0,035$  м.

## АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТА

### Структура и размер фронта пламени

Сечения расчетного фронта пламени (соответствующего изоповерхности  $c = 0,5$ ) приведены на рис. 1 для варианта расчета 4 в моменты времени  $t = 9,8; 20,1; 32,7; 44,4$  мс. Видно, что несмотря на большой размер сосуда силы плавучести не оказывают заметного влияния на сферичность распространения пламени. Данное наблюдение соответствует известным результатам: естественная конвекция деформирует сферический фронт в условиях, когда число Фруда превышает критическое значение  $Fr = 0,11$  [19]. В данном численном эксперименте в течение всего процесса горения  $Fr > 21$ . Из рис. 1 видно, что фронт пламени имеет ярко выраженную ячеистую структуру. Аналогичная форма фронта получена в вариантах расчета 1–3. Ячеистая структура крупномасштабного дефлаграционного пламени получена с использованием МКВ впервые.

В работе [20] показано, что ячеистая структура фронта пламени пропановоздушной смеси возникает при критическом числе Рейнольдса порядка  $10^4$ . Если предположить такое же критическое число Рейнольдса для водородовоздушных пламен, то ячеистая структура должна установиться при радиусе фронта

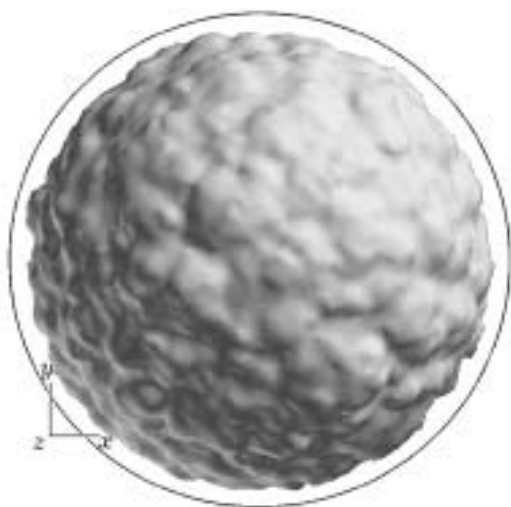


Рис. 2. Разрешаемая в расчете ячеистая структура фронта пламени:

вариант расчета 4,  $t = 44,4$  мс

$R_{ff} = Re\mu_u/S_u\rho_u = 0,084$  м. Как и следовало ожидать, ячеистая структура фронта пламени полнее разрешена в расчетах с наименьшим характерным размером контрольного объема — варианты расчета 2 и 4 ( $\Delta = 0,035$  м). Из рис. 1 видно, что размер ячеек растет во времени, что совпадает с экспериментальными наблюдениями [15]. Трехмерная картина развитой ячеистой структуры моделируемого фронта пламени (вариант расчета 4,  $t = 44,4$  мс) представлена на рис. 2. Здесь характерный размер ячеек достигает 0,35 м при среднем радиусе фронта порядка 1,05 м.

Развитие разрешаемой в расчете ячеистой структуры фронта ведет к увеличению поверхности пламени и ускорению процесса горения. Разрешенный в расчетах фактор турбулентности может быть оценен как  $\Xi = F_{c=0,5}/F_b$ , где  $F_{c=0,5}$  — площадь изоповерхности  $c = 0,5$ ,  $F_b$  — площадь поверхности воображаемой сферы того же объема, что и объем внутри изоповерхности  $c = 0,5$ . Разрешенный в расчетах фактор турбулентности развивается во времени вместе с разрешаемой ячеистой структурой фронта и достигает значений  $\Xi = 1,03$  и  $1,09$  в вариантах расчета 1 и 2 соответственно. Очевидно, что его более высокое значение в варианте 2 обусловлено применением адаптивной расчетной сетки, обеспечивающей более подробную дискретизацию во фронте пламени.

В настоящей работе средняя толщина

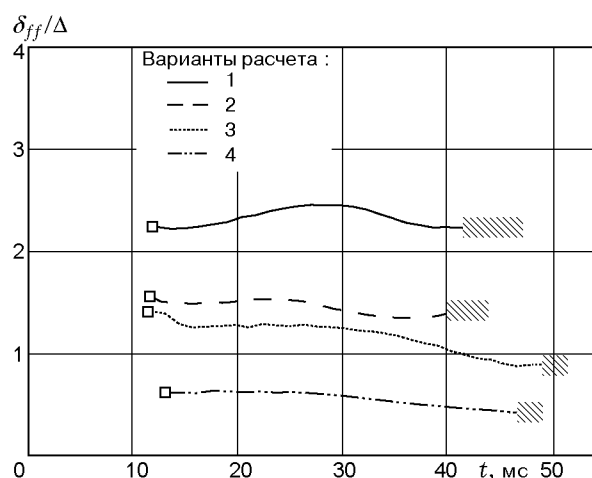


Рис. 3. Расчетная толщина фронта пламени:

□ — время, когда распространение пламени стабилизировалось после начала численного расчета, — интервал времени между моментом, когда изоповерхность  $c = 0,01$  впервые коснулась стенки сосуда, и моментом полного выгорания смеси

фронта пламени  $\delta_{ff}$  рассчитывалась как объем между изоповерхностями  $c = 0,01$  и  $c = 0,99$ , отнесенный к площади изоповерхности  $c = 0,5$  и затем нормализованный при помощи характерного размера начального контрольного объема  $\Delta = 0,07$  м. Расчетная толщина фронта, выраженная таким образом через число занимаемых им контрольных объемов, представлена на рис. 3. В расчетах горение инициировалось не точечным источником зажигания, как в эксперименте, а квазисферической областью, что требует сдвига результатов расчетов на время распространения реального пламени на расстояние, равное радиусу сферы зажигания. Теоретически в начальный момент времени радиус фронта равен нулю и на начальном этапе горения, когда изменением давления можно пренебречь, скорость фронта постоянна и равна  $S_{u0}E_0$  ( $E_0$  — коэффициент расширения,  $E_0 = \rho_u/\rho_b$ ), а следовательно, радиус пламени линейно растет во времени. Времена коррекции были получены совмещением по времени расчетной и теоретической зависимостей для радиуса фронта пламени после «отхода» фронта от области зажигания и составили 3,7, 4,0, 3,7 и 4,5 мс в вариантах расчета 1–4 соответственно.

Анализ толщины фронта пламени имеет смысл только в период времени между моментом стабилизации процесса горения после зажигания и до момента касания изоповерхности



стью  $c = 0,01$  стенки сосуда. Из рис. 3 видно, что применение адаптивной сетки (т. е. уменьшение в два раза характерного размера контрольного объема) снижает абсолютную толщину моделируемого фронта примерно в два раза. Применение модернизированного градиентного метода ( $N = 2$ ) ведет к дальнейшему уменьшению толщины как минимум еще в два раза и толщина фронта пламени практически совпадает с характерным размером использованного в расчетах контрольного объема. Уменьшение толщины фронта пламени ведет к ряду последствий. В частности, уменьшается «потерянное» для анализа время горения: время от момента касания изоповерхности  $c = 0,01$  стенки сосуда до полного выгорания смеси составило 5,7 и 4,4 мс в вариантах расчета 1 и 2 ( $N = 1$ ) и только 1,5 и 1,9 мс в вариантах 3 и 4 ( $N = 2$ ).

Необходимо отметить, что в случае неструктурированной сетки фронт пламени пересекает контрольный объем не по нормали к его грани, а случайным образом, и в реальности фронт в расчетах 3, 4 разрешается, как правило, несколькими контрольными объемами. В работе [9] рекомендовано разрешение как минимум четырьмя объемами. Можно предположить, что при толщине фронта ниже этого критерия будет уменьшаться скорость распространения пламени из-за уменьшения суммы  $\text{grad } c$  по нормали к фронту пламени до значений меньше единицы в силу недостаточной гладкости функции, обусловленной дискретизацией. Это подтверждается результатами, представленными на рис. 4, 5.

### Динамика давления

Сравнение экспериментальной динамики давления [16] с зависимостью  $p(t)$ , адаптированной согласно модели сосредоточенных параметров [21] и рассчитанной по модели крупных вихрей, представлено на рис. 4. Кривая МСП получена в результате подбора значений  $S_{ui}$  и  $\varepsilon$ , обеспечивающих максимальное совпадение кривых. Поэтому неудивительно, что она очень близка к экспериментальной зависимости, за исключением конечного участка, где давление снижается за счет теплопотерь в стенки сосуда. Данная процедура позволяет использовать параметры, полученные с помощью МСП на участке  $t = 0 \div 46$  мс, для верификации тех результатов расчета по

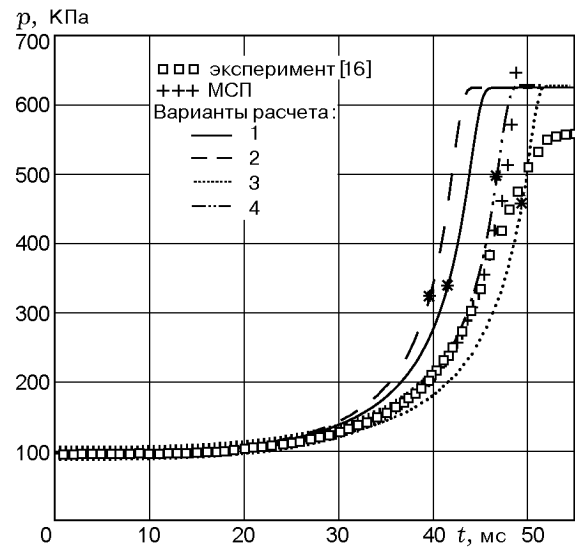


Рис. 4. Сравнение экспериментальной и расчетной динамики давления:

\* — момент касания изоповерхностью  $c = 0,01$  стенки сосуда

МКВ, для которых отсутствуют прямые экспериментальные данные. Полученное максимальное давление согласно предложенной модели для различных вариантов расчета лежит в пределах  $625,5 \div 627,8$  кПа. Это хорошо согласуется с давлением, вычисленным из условия термодинамического равновесия в закрытом сосуде ( $p = 623$  кПа), и несколько ниже максимального давления, рассчитанного по МСП ( $p = 648,4$  кПа). Данное незначительное различие обусловлено тем, что в расчетах согласно МКВ использовалась теплота реакции, вычисленная для изохорического процесса, что меньше теплоты реакции для условий постоянного давления:  $H_c = (h_u - h_b)|_{T_0=373 \text{ К}} = 3,13 \cdot 10^6 \text{ Дж} \cdot \text{кг}^{-1}$ .

Приблизительно с момента  $t = 46$  мс вторая производная экспериментальной скорости роста давления меняет знак на отрицательный из-за тепловых потерь в стенки сосуда. В расчетах по обеим моделям тепловыми потерями в стенки сосуда пренебрегали. В расчетах по МСП вторая производная всегда положительна. В расчетах по МКВ в конце горения вторая производная давления по времени становилась отрицательной. Это обусловлено конечной толщиной расчетного фронта пламени: после того как «передняя кромка» фронта ( $c = 0,01$ ) касается стенки сосуда (см. рис. 4), массовая скорость горения уменьшается, что ведет к снижению скорости роста давления. Более раннее

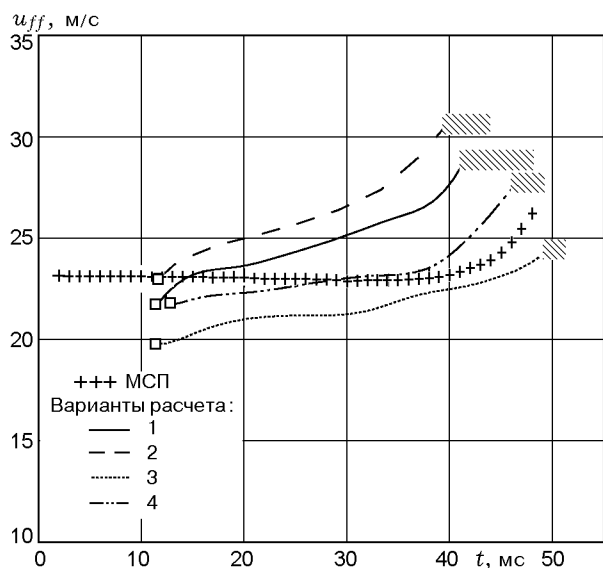


Рис. 5. Сравнение скоростей фронта пламени, рассчитанных согласно разработанной модели и модели сосредоточенных параметров:

□ — время, когда распространение пламени стабилизировалось после начала моделирования, — интервал времени между моментом, когда изоповерхность  $c = 0,01$  впервые коснулась стенки сосуда, и моментом полного выгорания смеси

(по уровню давления в сосуде) касание стенок сосуда фронтом пламени наблюдается в расчетах при  $N = 1$ .

Несмотря на видимое из рис. 4 лучшее совпадение экспериментальной зависимости  $p(t)$  с полученной по варианту расчета 4, необходимо отметить следующее. Как подчеркивалось выше, при численном моделировании в качестве исходных параметров использовались значения нормальной скорости горения и обобщенного термокинетического показателя, полученные методом обратной задачи в предположении сферического фронта пламени. Это означает, что вычисленные значения неявно учитывают влияние развивающейся в процессе взрыва ячеистой структуры. С другой стороны, расчеты согласно МКВ продемонстрировали явное разрешение по крайней мере части ячеистой структуры пламени, а значит, ее влияние было учтено дважды. Это, в свою очередь, означает что «правильная» расчетная кривая давления должна быть смещена влево по времени от экспериментальной кривой. В соответствии с внутренней структурой предложенной модели более подробная расчетная сетка должна привести к разрешению более мелких вихрей. Это, в свою очередь, вызовет более быстрое распро-

странение фронта пламени и дополнительное смещение кривой давления влево, что подтверждается сравнением результатов в вариантах расчета 1 и 2 на рис. 4. К сожалению, провести расчеты на более подробной расчетной сетке для дальнейшего изучения влияния размера контрольного объема на разрешаемую структуру фронта и динамику давления не представляется возможным из-за ограничений мощности доступной вычислительной техники. Тем не менее можно констатировать, что отличие расчетов от эксперимента в рамках сделанных предположений в пределах менее 10 % можно признать вполне удовлетворительным.

### Скорость фронта пламени

В настоящей работе скорость распространения фронта пламени оценивалась по средней скорости изоповерхности  $c = 0,5$ . Прямые экспериментальные данные по скорости фронта отсутствуют, и результаты МКВ сравниваются со скоростью фронта, рассчитанной по МСП (см. рис. 5). Начальный этап расчета, в течение которого происходила стабилизация процесса моделирования горения, и конечный этап, от момента касания стенки сосуда изоповерхностью  $c = 0,01$  до полного выгорания смеси, исключены из анализа.

Видно, что согласно МСП фронт пламени перемещается практически с постоянной скоростью 23 м/с в течение большей части процесса горения, за исключением небольшого периода в конце, где скорость возрастает до 26 м/с в связи с более значительным влиянием увеличения давления в сосуде по сравнению с известным явлением «торможения» пламени при приближении к стенке. Скорость фронта согласно предложенной модели качественно соответствует результатам применения МСП: темп роста скорости увеличивается к концу процесса горения. Более высокий темп роста скорости пламени по МКВ объясняется возникновением и развитием ячеистой структуры пламени в ходе процесса.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе описана численная модель для расчета динамики горения предварительно перемешанной смеси в закрытом сосуде. Разработанная модель основана на использовании метода крупных вихрей и гради-

ентного метода моделирования горения. Расчеты проводились на неструктурированной тетраэдральной расчетной сетке, позволяющей проводить адаптацию для увеличения дискретизации в области фронта пламени и уменьшения его толщины при умеренном увеличении необходимых компьютерных ресурсов.

Впервые методом крупных вихрей численно разрешена ячеистая структура сферического дефлаграционного фронта пламени.

Разработанная модель валидирована относительно экспериментальных данных по динамике взрыва начально-неподвижной стехиометрической водородовоздушной смеси в крупномасштабном сферическом сосуде объемом 6,37 м<sup>3</sup>. Модель воспроизводит динамику давления в замкнутом сосуде с точностью не хуже 10 %, что можно считать удовлетворительным для практических приложений.

Проведена верификация результатов численного расчета по результатам применения модели сосредоточенных параметров для скорости распространения фронта пламени.

В работе апробирована модификация градиентного метода моделирования горения предварительно перемешанных газов, позволяющая контролировать расчетную толщину фронта пламени. Необходимы дальнейшие исследования данного вопроса.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **American Institute of Aeronautics and Astronautics.** Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations. AIAA G-077-1998. ISBN 1563472856.
2. **Fire Safety Engineering.** Part 3: Assessment and Verification of Mathematical Fire Models. ISO TR 13387-3:1999.
3. **Birkby P., Cant R. S., Savill A. M.** The application of laminar flamelet model to confined explosion hazards // *Flow, Turbulence and Combust.* 1999. V. 63. P. 361–377.
4. **Bray K. N. C.** The challenge of turbulent combustion // *26th Symp. (Intern.) on Combustion.* 1996. P. 1–26.
5. **Bradley D.** Instabilities and flame speeds in large-scale premixed gaseous explosions // *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A.* 1999. V. 357. P. 3567–3581.
6. **Hawkes E. R., Cant R. S.** Physical and numerical realizability requirements for flame surface density approaches to large-eddy simulation of premixed turbulent combustion // *Combust. Theory and Modelling.* 1999. V. 5. P. 699–720.
7. **Poinsot T., Veynante D.** *Theoretical and Numerical Combustion.* Edwards, 2001.
8. **Chakravarthy V. K., Menon S.** Subgrid modelling of turbulent premixed flames in the flamelet regime // *Flow, Turbulence and Combust.* 2001. V. 65. P. 133–161.
9. **Catlin C. A., Fairweather M., Ibrahim S. S.** Prediction of turbulent, premixed flame propagation in explosion tubes // *Combust. Flame.* 1995. V. 102. P. 115–128.
10. **Yakhot V., Orszag S.** Renormalization group analysis of turbulence. I. Basic theory // *J. Scientific Computing.* 1986. V. 1. P. 3–51.
11. **Либби П., Вильямс Ф.** Турбулентные течения реагирующих газов. М.: Мир, 1983.
12. **Vervisch L., Veynante D.** Interlinks between approaches for modelling turbulent flames // *28th Symp. (Intern.) on Combustion.* 2000. P. 173–185.
13. **Oran E. S., Boris J. P.** *Numerical Simulation of Reactive Flow.* Elsevier, 1987.
14. **Weller H., Tabor G., Gosman A., and Fureby C.** Application of a flame-wrinkling LES combustion model to a turbulent mixing layer // *27th Symp. (Intern.) on Combustion.* 1998. P. 899–907.
15. **Bradley D., Cresswell T. M., Puttock J. S.** Flame acceleration due to flame-induced instabilities in large-scale explosions // *Combust. Flame.* 2000. V. 124. P. 551–559.

16. **Kumar R. K., Tamm H., Harrison W. C.** Combustion of hydrogen at high concentration including the effect of obstacles // *Combust. Sci. Technol.* 1983. V. 35. P. 175–186.
17. **Мольков В. В., Некрасов В. П.** Нормальная скорость распространения пламени ацетоно-воздушной смеси в зависимости от давления и температуры // *Физика горения и взрыва.* 1981. Т. 17, № 3. С. 45–49.
18. **Kee R. J., et al.** CHEMKIN Collection. Reaction Design, Inc., San Diego, 2000.
19. **Бабкин В. С., Выхристюк А. Я., Кривулин В. Н., Кудрявцев Е. А.** Конвективная неустойчивость сферических пламен // *Archivum Combustionis.* 1984. Т. 4. С. 321–327.
20. **Groff E. G.** The cellular nature of confined spherical propane-air flames // *Combust. Flame.* 1982. V. 48. P. 51–62.
21. **Molkov V., Dobashi R., Suzuki M., and Hirano T.** Venting of deflagrations: hydrocarbon-air and hydrogen-air systems // *J. Loss Prevention in Process Industries.* 2000. V. 13. P. 397–409.

*Поступила в редакцию 10/II 2003 г.,  
в окончательном варианте — 16/VI 2003 г.*

---

## ВНИМАНИЮ ЧИТАТЕЛЕЙ

Исправления к статье Д. В. Макарова, В. В. Молькова  
«Моделирование динамики газового взрыва  
в невентилируемом сосуде методом крупных вихрей»,  
опубликованной в № 2 за 2004 г.

В тексте статьи на с. 15, 16 выражения для подсеточного и эффективного тензоров напряжений и связанного с ними диссипативного члена в уравнении энергии должны читаться следующим образом:

$$\tau_{ij,SGS} = \mu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right),$$

$$\bar{\tau}_{ij,eff} = \bar{\tau}_{ij} + \tau_{ij,SGS} = \mu_{eff} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right),$$

$$\overline{u_i \tau_{ij}} = \tilde{u}_i \bar{\tau}_{ij,eff} = \tilde{u}_i \mu_{eff} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right).$$

Уравнение сохранения количества движения (10) и уравнение сохранения энергии (11) выглядят в итоге следующим образом:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu_{eff} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \right) + \bar{\rho} g_i, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{E}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{u}_j (\bar{\rho} \tilde{E} + \bar{p})) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu_{eff} c_p}{\text{Pr}_{eff}} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} - \sum_m \tilde{h}_m \left( -\frac{\mu_{eff}}{\text{Sc}_{eff}} \frac{\partial \tilde{Y}_m}{\partial x_j} \right) + \right. \\ \left. + \tilde{u}_i \mu_{eff} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \right) + \bar{S}_E. \quad (11) \end{aligned}$$