

Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова «Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности» 17:15-18:00, 1 октября, 2019 СКЦ МГУ, Москва

Детальное численное моделирование нестационарных процессов горения газовых смесей и газовзвесей с использованием суперкомпьютеров

Яковенко И.С., Киверин А.Д.



Объединенный Институт Высоких Температур Российской Академии Наук

Лаборатория Математического Моделирования

Содержание

> Введение.

Область исследований и конкретные задачи

Вычислительные технологии и алгоритмы.

Используемые численные алгоритмы и технологии

высокопроизводительных вычислений. Особенности численного анализа и тестирования вычислительных кодов.

Дефлаграционное и диффузионное горение. Механизмы распространения. Теория и эксперимент.

Нестационарные режимы распространения пламени.

Ускорение пламени и переход к детонации как яркие примеры нестационарных задач горения.

Газодинамика воспламенения в рамках эксперимента в ударных трубах

Особенности структуры течения за падающей ударной волной в канале.

Влияние дисперсной фазы на процессы воспламенения и развития горения

Инициирование детонации и интенсификация горения.

Особенности моделирования горения

• Горение – сложный процесс характеризующийся большим количеством пространственно-временных масштабов.

Пространственные масштабы: начиная от ширины фронта горения (доли миллиметра), заканчивая размерами реактора (до нескольких метров). <u>Временные масштабы</u>: начиная от времени индукции смеси (десятки микросекунд) заканчивая полным временем сгорания смеси (минуты и выше).

 Детальное моделирование распространения пламени требует использования полных механизмов химической кинетики. В результате в каждой расчетной ячейке необходимо решать систему обыкновенных дифференциальных уравнений моделирующую химические превращения. Данная система уравнений зачастую является жесткой.

 Наиболее интересными с точки зрения фундаментальных и прикладных задач являются нестационарные режимы горения, в ходе развития которых характеристики течения и термодинамические параметры могут меняться в широком диапазоне.

Введение



Диффузионное горение, околопредельные пламена Эксперимент и расчет (6% H₂-Boздух), 2018.

Дефлаграционное горение



Нестационарные и высокоскоростные режимы

распространения пламени

Математические модели



Численные алгоритмы

1. Классический Эйлерово-Лагранжев метод (ЭЛМ) (FLIC или метод "крупных" частиц) [Belotserkovsky, 1982].

Плюсы: + Устойчив и надежен. Позволяет прямое моделирование сложных газодинамических течений с интенсивными ударными волнами.
 + Вычислительно эффективен. Имеет небольшой вычислительный шаблон.
 + Легко реализовать даже в случае сложных нестационарных реагирующих течений с табличными уравнениями состояния.

Минусы: - Высокая схемная вязкость.



Численные алгоритмы

2. Схема «КАБАРЕ» (CABARET) [Karabasov and Goloviznin, 2009].

Плюсы: + Процедура решения построена таким образом чтобы полностью исключить схемную вязкость

- + Наименьший вычислительный шаблон
- + Монотонность достигается естественными процедурами коррекции

Минусы: - Не так широко распространен

- Требует дополнительных исследований, в особенности для решения моделирования многокомпонентных течений

3. Уравнения в приближении малых чисел Маха решаются с помощью явного метода типа предиктор-корректор [McGrattan, 2004].

Вычислительные технологии



^{*}Программный комплекс NRG: <u>https://github.com/yakovenko-ivan/NRG</u>



Вычислительные технологии



Характерной особенностью моделирования процессов горения является сильная неоднородность вычислительной нагрузки. Наиболее трудоемкие процедуры решения уравнений химической кинетики выполняются только подобластях с зонами реакции. Два теста — тепловой взрыв и газодинамика инертной смеси представляют собой экстремальные случаи полного отсутствия химических превращений и протекания реакции во всем объеме.

Верификация и валидация вычислительных методик



Ламинарная скорость является наиболее одним ИЗ важных горения газообразных параметров смесей. Ламинарная газовых скорость горения меняется В широком диапазоне при состава горючей смеси. изменении также зависит условий а OT протекания процесса И собой удобную представляет апробации величину ДЛЯ вычислительных методик.



[Bykov, Kiverin, Koksharov, Yakovenko // Comp. fluids, 2019, in print]

Ламинарная скорость горения и ширина фронта пламени определяют основные пространственно-временные масштабы процесса. Целесообразно оценивать область сходимости численного алгоритма относительно этих величин.

Верификация и валидация вычислительных методик



12

Дефлаграционное горение в замкнутом объеме заполненном горючей смесью

Стехиометрическая смесь H₂-O₂



Бездиссип	ативны	ые мет	одики,	
такие как	КАБАІ	РЕ поз	воляют	
воспроизв		спектр		
акустических возмещений			щений	
генерируемых		φι	фронтом	
горения	В	зам	кнутых	
объемах,		без	ИХ	
искусственного сглаживания.				

Дефлаграционное горение в замкнутом объеме заполненном горючей смесью





14

методы,

примеру

ввиду

быть

точность

особенностей

Κ

интерес

может

Инициирование детонации нестационарным источником энергии



Расчет по методу «крупных частиц» дает искусственное сцепление фронта пламени и ударной волны непосредственно после окончания энерговыделения. Такое поведение решения обусловлено тем что метод крупных частиц дает более широкий фронт пламени при использовании одного размера расчетной ячейки, по сравнению с методом КАБАРЕ.

[Yakovenko I.S., Kiverin A.D., Pinevich S.G., Ivanov M.F. // IOP Conf. Ser. 774, 2016. 012093.]

Инициирование детонации нестационарным источником энергии



В то же время метод КАБАРЕ значительно лучше разрешает фронт реакции и фронт ведущей ударной волны, что определяет последующий нестационарный характер эволюции волны горения. Детонация в данном случае формируется в пересжатом режиме, как результат ускорения пламени за ведущей ударной волной.

[Yakovenko I.S., Kiverin A.D., Pinevich S.G., Ivanov M.F. // IOP Conf. Ser. 774, 2016. 012093.]

Инициирование детонации нестационарным источником энергии



Наконец, решения по обоим методам выходят на стационарные параметры скорости распространения детонации (~2730 м/с) и давления в пике Неймана (~21 атм).

[Yakovenko I.S., Kiverin A.D., Pinevich S.G., Ivanov M.F. // IOP Conf. Ser. 774, 2016. 012093.]

Дефлаграционные и диффузионные пламена

Экспериментальные факты

- Нижний концентрационный предел распространения пламени в бедных водородно-воздушных смесях составляет величину порядка ~ 4-6% H₂ при нормальных условиях. При этом переделы распространения пламени вверх и вниз различны.
- При ~ 10% Н₂ происходит смена физических механизмов распространения пламени, ражим горения меняется с диффузионного на дефлаграционный.



 $\Delta t = 100 \text{ ms}$



Особенности развития ультра-бедных пламен в условиях земной гравитации



[Yakovenko I.S., Ivanov M.F., Kiverin A.D., Melnikova K.S.// Intl. Journal Hydrogen Energy. 43, 2018. 1894.] [Kiverin A.D., Yakovenko I.S., Melnikova K.S.// IOP Conf. Ser. 1147, 2019. 012048.]

Особенности развития ультра-бедных пламен в условиях земной гравитации



[Yakovenko I.S., Ivanov M.F., Kiverin A.D., Melnikova K.S.// Intl. Journal Hydrogen Energy. 43, 2018. 1894.] [Kiverin A.D., Yakovenko I.S., Melnikova K.S.// IOP Conf. Ser. 1147, 2019. 012048.]

Особенности развития ультра-бедных пламен в условиях земной гравитации



Ускорение пламени

Экспериментальные факты

- Ускоряющееся пламя перед переходом к детонации распространяется в так называемом режиме «запертого» пламени.
- Переход к детонации происходит либо на фронте запертого пламени, либо на контактной границе перед фронтом.
- Переход к детонации происходит только в высокоактивных смесях.



Ускорение пламени и переход к детонации



23

Структуры течения, формируемые ускоряющимся пламенем: Визуализация



[Ivanov M.F., Kiverin A.D., Yakovenko I.S., Liberman M.A. // Intl. Journal Hydrogen Energy. 38, 2013. 16427.]



Структуры течения, формируемые ускоряющимся пламенем: Визуализация



Около и сверхзвуковые режимы распространения пламени в загроможденных каналах



В загроможденных каналах при определенных reometpuчeckux условиях ведущая ударная волна и переотраженные от препятствий волны формируют стоячие волны. В таком случае, влияние волн сжатия на фронт горения минимально и режим запертого пламени может быть реализован.



[Kiverin A.D., Yakovenko I.S., Ivanov M.F. // Intl. Journal Hydrogen Energy. 41, 2016. 22465.]

Около и сверхзвуковые режимы распространения пламени в загроможденных каналах

Смесь водород – воздух с 32.5% водорода

Ширина канала: 1 см

Blockage ratio: 0.2 с расстояниям между препятствиями 5 mm



Классификация высокоскоростных режимов горения

и критерии их реализации

Ha основе всестороннего физических анализа механизмов формирования высокоскоростных режимов особенностей горения И химической кинетики процесса была предложена классификация режимов разработаны горения И универсальные критерии высокоскоростных реализации режимов горения В предварительно перемешанных горючих газовых смесях.

[Kiverin A.D., Yakovenko I.S., Ivanov M.F. //
Intl. Journal Hydrogen Energy. 41, 2016. 22465.]
[Kiverin A.D., Yakovenko I.S.//
Mat. Model. Nat. Phenomena. 13, 2018. 54.]
[Kiverin A.D., Yakovenko I.S.//
Comb. Sci. Tech., 2018. in print] 28



Механизмы воспламенения в экспериментах в ударных

трубах (c) Эксперимент ударной В 6 трубе является одним из 5 4 ([srl]1)boJ наиболее Experiments [3] 812 P=2 MPa (normalized) распространенных O Shock tube 3 × Flow reactor способов исследования Flow reactor △ Rapid compression экзотермических реакций 0.8 1.2 1.4 1.6 1000/T[K-1] в газовых смесях. Medvedev et.al // Comb. flame 2010 y (cm) 2.0 1.0 0.0 y (cm) 2.0 1.0 0.0 y (cm) 2.0 1.0 (cm) 2.0 1.0 0.0 16.0 8.0 18.0 14.0 12.0 10.0 Khochlov et. al. (calculations) Grogan Ihme (calculations) // // ICDERS 2015 Proc. Comb. Inst. 2015 Blumenthal et.al (experiment) //

4.14ms

5.96ms

7.13ms

Hanson, Davidson (experiment) // ICDERS 2015

9.03ms

10.694ms

3.39ms

Comb. Sci. Tech. 1996

29

4 mm

Очаговое воспламенение

Эволюция течения, газодинамическая неустойчивость



Pakdaman S.A. // Thesis 2014

Очаговое воспламенение

Эволюция течения, газодинамическая неустойчивость



[Kiverin A., Yakovenko I.// **Phys. Rev. Fluids**, 3 (2018) 053201] [Kiverin A., Yakovenko I.// **Phys. Lett. A**, 382 (2018) 309]

Очаговое воспламенение

Развитие волны экзотермической реакции





Инициирование детонации в дисперсных средах



Канал заполнен стехиометрической смесью водорода с кислородом при нормальных условиях. В слое шириной L₁ содержатся инертные микрочастицы частицы.

В начальный момент времени мгновенно включается источник излучения на левой стенки канала. Излучение от источника соответствует излучению черного тела с температурой T_s = 5800 К [параметры источника заимствованы из **Berkowitz at al. 2011**].

Режимы формирования детонации в дисперсных средах



а) Прямое инициирование детонации в слое начальной толщины 0.5 см, b) Инициирование детонации в результате развития нестационарного процесса ускорения пламени в слое толщиной 1.7 см с) инициирование детонации в результате взаимодействия волны горения и переотраженных ударных волн в слое начальной ширины 2.0 см.

[Efremov V.P., Ivanov M.F., Kiverin A.D., Yakovenko I.S.// **Results in Physics**, 5 (2015) 290] [Efremov V.P., Ivanov M.F., Kiverin A.D., Yakovenko I.S.// **JTPL**, 42 (2016) 194]

Влияние микрокапель воды на распространение обедненного пламени в замкнутом объеме



Структура фронта пламени



В присутствии капель воды, структура фронта пламени становится более развитой чем в случае горения чистой газовой смеси. Площадь фронта горения увеличивается с уменьшением расстояния между каплями.

Динамика развития горения



Темпы нарастания давления в замкнутом объеме





Микрокапли воды существенно усиливают процесс горения что может быть продемонстрировано кривыми роста давления от времени. Время сгорания смеси уменьшается с уменьшением расстояния между каплями. Сокращение времени процесса сильнее для более крупных капель.

Заключение

Нестационарные процессы горения зачастую сопровождаются формированием сложных газодинамических течений. Для глубокого понимания нестационарного горения необходимы точное воспроизведение и корректная интерпретация газодинамических процессов.

Выбор подходящей вычислительной методики для решения различных задач, связанных с эволюцией реагирующих потоков, является важнейшим этапом процесса математического моделирования горения.

Для точного воспроизведения химических превращений, и следовательно всего процесса горения, необходимо использование детальных механизмов химической кинетики. Это условие определяет высочайшие требования к вычислительным ресурсам и в частности диктует необходимость использования суперкомпьютеров даже для решения фундаментальных задач физики горения и взрыва.

Наша команда



Лаборатория Математического Моделирования Объединенного Института Высоких Температур РАН

- Киверин А.Д. к.ф.-м.н., Заведующий лабораторией.
 - Яковенко И.С. к.ф.-м.н., старший научный сотрудник.

Направления: Газовая динамика горения, высокопроизводительные вычисления.

• Смыгалина А.Е. – к.ф.-м.н., научный сотрудник.

Направления: двигатели внутреннего сгорания, апробация механизмов химической кинетики.

- Мельникова К.С. младший научный сотрудник.
 Направления: околопредельное горение, биотопливо.
- Минаев К.О. студент.

Направления: процессы воспламенения в рамках экспериментов в ударных трубах.

Спасибо за внимание!



Opportunities for turbulence flows modeling via classical Euler-Lagrange scheme



Evolution of axial integral scale Λ_{zz} with variation in crank angle on the compression stroke. Dashed line – experimental curve [Breuer S. et. al. // Flow, Turbulence and Combustion, 2005]. Solid line – calculations via CPM approach [E.N. Ivanov, M.F. Ivanov // Math. Model., 2010]. Stroke frequency – 2000 rpm.

Введение



Дефлаграционные и диффузионные пламена

Дефлаграционное пламя

Основными механизмами распространения классической дефлаграционной волны горения являются перенос тепла и активных радикалов из зоны горения к предпламенной зоне.

Я.Б. Зельдович «Математическая теория горения и детонации», М.: Наука, 1980.



$$T = T_0 + (T_b - T_0) e^{u_n x/x}$$

Распределение температуры на фронте горения. / – ширина предпламенной зоны, зона реакции выделена штриховыми линиями, х < 0 несгоревшая смесь, х > продукты горения



Kim et. al. // IJHE, 2018

Дефлаграционные и диффузионные пламена

Диффузионное горение

В случае избытка окислителя легкий водород диффундирует в зону горения устойчивого сферического очага горения – «шарика» пламени.

В условиях микрогравитации весь доступный водород сгорает в локализованном очаге горения.

$$T_{1}^{0} = T_{0} + (T_{b}' - T_{0}) r_{0}/r, \qquad T_{2}^{0} = T_{b}'$$

$$a_{1}^{0} = a_{0} (1 - (r_{0}/r)), \qquad a_{2}^{0} = 0.$$

Я.Б. Зельдович «Математическая теория горения и детонации», М.: Наука, 1980.

Рис. 4.18

Неподвижный относительно горючей смеси парик, на поверхности которого происходит сгорание по диффузионному механизму Белые стрелки показывают подвод горючих веществ, черные стрелки — отвод тепла и продуктов сгорания. Внизу показаны распределения температуры и концентрации в радиальном направлении





Ronney P.D. et. al. NASA Lewis Research Center, 1997



Дефлаграционное горение внутри камеры заполненной предварительно перемешанной горючей смесью

Взаимодействие между фронтом горения и акустическими полями, формируемыми в результате расширения продуктов горения является одним из важнейших механизмов определяющих структуру фронта горения и скорость его распространения



Дефлаграционное горение внутри камеры заполненной предварительно перемешанной горючей смесью



Использование классической вычислительной методики для решения уравнений динамики реагирующих потоков приводит к занижению интенсивности процесса развития пламени по достижению пламенем стенок канала.

Причиной этому является недостаточная точность воспроизведения акустических колебаний формируемых между пламенем и стенками камеры.

Расчеты ОИВТ РАН (16% H₂- Воздух), 2015.



Эксперимент (16% H₂- Воздух), 2015.



Deflagration inside closed vessel filled with premixed combustible mixture



Расчеты учетом поглощения импульса С при взаимодействии акустических волн CO стенками позволило канала получить деформацию спектра пульсаций давления, что более привело К интенсивному росту мелкомасштабных структур на поверхности пламени и ускорению его движения к стенкам в целом.



Горение бедных составов в замкнутых объемах в условиях нормальной гравитации



Rectangular volume filled with 8% H_2 -Air mixture .

Стадии медленного горения в замкнутых объемах

- Изотропное расширение пламени Isotropic flame expansion;
- Подъем пламени в гравитационном поле и стратификация Flame rising in gravitational field and stratification;
- Развитие термодиффузионной неустойчивости и неустойчивости
 Рихтмайера-Мешкова на поверхности пламени;
- Взаимодействие с волнами сжатия отраженными от стенок объема;
- Догорание вниз;
- Догорание обедненных областей.

Горение бедных составов в замкнутых объемах в условиях нормальной гравитации



51

Структуры течения, формируемые ускоряющимся пламенем:

Сжатие свежей смеси

Silvestrini et. al. // JLP, 2008



Свежая смесь сжимается в результате воздействия серии волн сжатия излучаемых движущимся источником энергии (фронтом горения). Характер сжатия соответствует условиям на адиабате Гюгонио.



enclosures (e.g. tubes and galleries) for gas-air and dust-air mixtures. (AIChE, 1994; Eder, Gerlach, & Mayinger, 1999; Gardner, Winter, & Moore, 1986; Gmurczyk & Grosshandler, 1995; Greenwald & Wheeler, 1925; Kauffman et al. 1982; Pineau & Ronchail, 1982; Srinath et al., 1985).

Два механизма сжатия смеси при

распространении пламени

- Продукты горения расширяются в замкнутом объеме и толкают газ вперед по каналу. Именно этот процесс определяет ускорение пламени на начальных стадиях процесса.
- Энергия, выделяемся в зоне реакции передается акустическими волнами свежей смеси.

Распространяющееся пламя û движущийся источник энергии

Kurylo J., Dwyer H.A., Oppenheim A.K.// AIAA J. 1980. V. 18. № 3. P. 302-308.

Deshaies B., Joulin G.// Comb. and flame. 1989. 77. P. 201-212.





Фронт пламени

Волны сжатия

Два механизма сжатия смеси при распространении пламени

- Продукты горения расширяются в замкнутом объеме и толкают газ вперед по каналу. Именно этот процесс определяет ускорение пламени на начальных стадиях процесса.
- Энергия, выделяемся в зоне реакции передается акустическими волнами свежей смеси.



Kurylo J., Dwyer H.A., Oppenheim A.K.// AIAA J. 1980. V. 18. № 3. P. 302-308.



Deshaies B., Joulin G.// Comb. and flame. 1989. 77. P. 201-212.





Структура пламени на финальной стадии ускорения

Когда пламя достигает локальной скорости звука, волны излучаемые зоной энерговыделения оказываются запертыми сверхзвуковым потоком. Это определяет непрерывное сжатие в зоне реакции. В случае положительной обратной связи между скоростью горения и давлением, пламя ускоряется.



55

Переход к детонации в результате роста скорости горения с давлением



Непрерывное ускорение сжатие И реакций во фронте горения приводит к формированию ударной волны на масштабах фронта горения. Взаимодействие между фронтом И ударной волной ведет к формированию детонации [Ivanov M.F. et. al.// DAN, 2010]





M: 0.28 0.49 0.03 0.06 0.7 0.09 0.91 0.12 0.15 ¹⁷⁰ **x, mm** ²⁰ x, mm x, mm x, mm 0.26 0.52 0.15 0.78 0.2 1.04 0.25 ¹⁹⁰ x, mm ³⁰ **x**, mm³ 205 x, mm x,mm

Переход к детонации в результате роста скорости горения с давлением

Квази-стационарное высокоскоростное пламя



Механизм формирования детонации Влияние химической кинетики на структуру запертого пламени

При высоких скоростях сжатия (или при продолжительном сжатии) температура смеси может достигнуть предельного значения, которое определяет переход от реакций ветвления цепей к реакциям обрыва цепей. При этом начинают развиваться экзотермические реакции что влияет на скорость горения в предпламенной зоне. В конце концов, в предпламенной зоне может зародится очаг вторичного воспламенения.



Механизм формирования детонации в "горячих точках"



Если реализуется квази-стационарный режим распространения пламени, тогда волны сжатия отстающие от фронта горения могут нагнать его на стадии торможения пламени. В результате пламя ускорится снова. Горячие газы внутри 111 выталкиваются вперед, формируя зоны комплекс состоящий из контактной поверхности и волны сжатия перед ней. Если условия перед фронтом горения соответствуют условиям выше температуры «кроссовера», тогда контактная поверхность перед фронтом может стать новым очагом горения

