УДК 519.6

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ В УСТАНОВКАХ КРУПНОГО МАСШТАБА С ПОМОЩЬЮ ПРЕЦИЗИОННОГО ВИХРЕРАЗРЕШАЮЩЕГО КОДА CABARET-COMBUSTION

© 2022 г. А. И. Гавриков^{1,} *, А. Данилин¹, А. А. Канаев¹, А. Е. Киселев¹

¹Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, Москва, Россия *e-mail: gavrikovandrey@yandex.ru

> Поступила в редакцию 16.03.2022 г. После доработки 14.04.2022 г. Принята к публикации 18.04.2022 г.

В работе проведена верификация расчетного кода CABARET-COMBUSTION, основанного на численной вихреразрешающей методике КАБАРЕ и предназначенного для расчета, в том числе детонации перемешанных однородных и неоднородных водородно-воздушных смесей. В качестве материала для верификации используются экспериментальные данные, полученные на серии крупномасштабных экспериментов по детонации водородовоздушных смесей в открытой полусфере и в замкнутом объеме сложной геометрии. Проведенные верификационные исследования кода CABARET-COMBUSTION на данных экспериментов, направленных на изучение процессов, связанных с детонацией водорода, и результаты кросс-верификации показывают высокую точность соответствия расчетных и измеренных данных при условии учета определяющих процессов и использования достаточно подробной сеточной модели.

Ключевые слова: детонация, CFD код, верификация, крупномасштабные эксперименты, кросс-верификация

DOI: 10.31857/S0002331022040057

введение

Водородная энергетика (ВЭ) представляется перспективным альтернативным направлением развития топливно-энергетического комплекса России вследствие экологичности используемого топлива и продукта реакции окисления в воздухе, лежащей в основе получения энергии, высокой теплоты, выделяющейся в ходе этой реакции, а также широкого распространения этого химического элемента. В октябре 2020 г. Правительством РФ был утвержден План мероприятий по теме "Развитие водородной энергетики в Российской Федерации до 2024 года", направленный на увеличение производства и расширение сферы применения водорода в качестве экологически чистого энергоносителя, а также вхождение страны в число мировых лидеров по его производству и экспорту. Водород, однако, является легко воспламеняемым газом, высокая удельная теплота сгорания водорода в воздухе обусловливает опасность водородных взрывов при аварийных утечках водорода в воздух. Данные особенности топлива требуют, в том числе, вычислительных инструментов для численной оценки последствий возможных аварий, связанных с ускоренным горением в газовой среде, так и экспериментальных данных для верификации разработанных численных моделей. Разработка перспективных моделей и инструментов на основе CFD и их валидация на современных экспериментальных данных, полученных с высококачественной диагностикой, позволит увеличить прогнозные возможности численного моделирования и проводить анализ гипотетических аварий на качественно новом уровне. Применение вихреразрешающих подходов к моделированию турбулентности для обоснования безопасности ВЭ позволяет устранить неопределенности, возникающие при использовании полуэмпирических RANS-моделей турбулентности, основанных на решении осредненных по времени уравнений Навье-Стокса, и за счет этого повысить прогнозные возможности в части распространения водорода.

Цель настоящей работы — верификация расчетного кода CABARET-COMBUSTION, основанного на численной вихреразрешающей методике КАБАРЕ [1] и предназначенного для расчета, в том числе, детонации перемешанных однородных и неоднородных водородно-воздушных смесей. В качестве материала для верификации используются экспериментальные данные, полученные на серии крупномасштабных экспериментов по детонации водородовоздушных смесей в открытой полусфере и в замкнутом объеме сложной геометрии.

Данная работа является продолжением верификации серии расчетных кодов, основанных на численной методике КАБАРЕ. Ранее верификация версии кода CABARET-SC1, основанного на данной методике, была проведена в работе [2] на экспериментах по распространению струй в газовых средах.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Модель движения газовой смеси. Движение газовой смеси определяется системой уравнений

$$\partial_{t} \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0;$$

$$\partial_{t}(\rho u_{i}) + \operatorname{div}(\rho u_{i}\mathbf{u}) = -\nabla_{i}p + \nabla_{j}\tau_{ij} + \rho g_{i}, \quad i, j = 1, 2, 3;$$

$$\partial_{t}(\rho E) + \operatorname{div}((\rho E + p)\mathbf{u}) = \nabla \mathbf{q} + \nabla_{j}(u_{i}\tau_{ij});$$

$$\partial_{t}(\rho \xi_{k}) + \operatorname{div}(\rho \xi_{k}\mathbf{u}) = \rho \xi_{k}, \quad k = 1, N;$$
(1)

где ρ , **u**, *p*, *E* — плотность, скорость, давление, полная внутренняя энергия; ξ_k , ξ_k — массовая доля и скорость химических превращений *k*-го компонента газовой смеси. Система (1) дополняется уравнением состояния газовой смеси

$$p = \rho RT \sum_{k=1}^{N} \frac{\xi_k}{\mathbf{M}_k};$$
(2)

где R — универсальная газовая постоянная; T — температура; M_k — молярная масса k-го компонента газовой смеси. Далее в качестве компонентов смеси рассматриваются водород (H₂), кислород (O₂), азот (N₂), водяной пар (H₂O). Соотношение долей кислорода и азота соответствует воздуху.

Диффузионный перенос представлен в системе (1) тензором вязких напряжений τ_{ij} и плотностью теплового потока **q**, определяемого законом Фурье. Соответствующие коэффициенты вязкости и теплопроводности газовых смесей вычисляются в соответствии с зависимостями, приведенными в [3]. Действие внешних сил представлено гравитацией **g**.

Термодинамические параметры газов — теплоемкости при постоянном объеме и давлении, энтальпия и внутренняя энергия определяются полиномиальными зависимостями [4], соответствующим термодинамической базе данных [5].

Одностадийная модель химической кинетики

В рамках рассматриваемой модели горения химическая кинетика описывается одностадийной необратимой реакцией, то есть топливо (водород) и окислитель (кисло-

| Объемная доля водорода | A_0 | T_A, \mathbf{K} | а | b |
|------------------------|----------------------|-------------------|-----|-----|
| <20% | 6×10^{13} | 19855 | 1 | 0.5 |
| >20% | 2.6×10^{10} | 8665 | 0.2 | 1.2 |

Таблица 1. Параметры одностадийной модели химической кинетики для водородно-воздушных смесей из работы [6]

род) преобразуются сразу в продукт реакции, минуя стадии накопления и рекомбинации радикалов:

$$2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O. \tag{3}$$

Данное предположение допустимо, поскольку в рамках используемой модели распространения пламени скорость горения определяется соответствующими эмпирическими или аналитическими корреляциями, а не механизмом детальной химической кинетики, а массовые доли химических радикалов кроме топлива, окислителя и продуктов реакции, участвующих в ней, мала, что оказывает малое влияние на термодинамику процесса.

В работе используется выражение для кинетики горения водорода в водородно-воздушных смесях, предложенное в работе [6]:

$$S = A[H_2]^a [O_2]^b \exp(-T_A/T),$$
(4)

где A — предэкспоненциальный фактор; [H₂], [O₂] — молярные концентрации водорода и кислорода; a, b — степенные показатели; $\exp(-T_A/T)$ — множитель Аррениуса; T_A — температура активации.

В [6] предполагается использовать два набора коэффициентов модели для различных концентраций водорода, данные зависимости приведены в табл. 1.

Численный алгоритм

В основу кода ПрЭВМ CABARET-COMBUSTION положен численный алгоритм (схема) КАБАРЕ, основы которого в работе [7]. В настоящий момент алгоритм обладает следующими свойствами:

- консервативность;
- второй порядок аппроксимации по времени и пространству;
- имеет компактный вычислительный шаблон, ограниченный одной ячейкой;
- используется на сетках с ячейками в виде скошенных кубов;
- поддерживает трансзвуковые и сверхзвуковые течения;

- разрешает ударные волны двумя расчетными ячейками.

РЕЗУЛЬТАТЫ ВАЛИДАЦИИ КОДА CABARET-COMBUSTION

Эксперимент по детонации стехиометрической водородно-воздушной смеси в полусферическом объеме

Эксперименты по детонации водородно-воздушных смесей в полусферических объемах были проведены в институте Фраунгофера в 1991 году [8]. В эксперименте проводится прямая инициализация детонации стехиометрической водородно-воздушной смеси в полусфере, ограниченной пленкой, с последующим выходом детонационной волны в открытое пространство с последующим ее затуханием. В эксперименте измеряется динамика давления на датчиках, расположенных на различном рас-



Рис. 1. Схема эксперимента с прямой инициализацией детонации. Полусфера, заполненная стехиометрической водородно-воздушной смесью, и схема расположения датчиков давления [8].

стоянии от точки инициализации детонации. Численное моделирование данного эксперимента, в силу ударно-волнового механизма распространения детонационных волн, не требует специальных моделей распространения фронта пламени, необходима лишь модель химической кинетики, отвечающая реагирующей смеси. Также в нем не требуется моделирования лучистого теплообмена в силу слабого излучения водородных пламен и плавучести в силу скоротечности процесса. Таким образом, результаты эксперимента можно использовать для проверки газодинамического алгоритма и заложенных в него термодинамических свойств реагирующих веществ.

Радиус полусферического объема с водородно-воздушной смесью составляет 2.95 метра. Объем был наполнен смесью водорода (29.05% по объему) и воздуха (70.95%) при давлении в 1 атмосферу и температуре 304 К. Общая масса водорода в установке при этом составляет 1.32 кг водорода. Смесь была перемешана при помощи вентилятора. Для прямой инициализации детонации в центре круглой площади соприкосновения объема с землей было заложено взрывчатое вещество. Для фиксации хода эксперимента использовались датчики давления и высокоскоростная камера. Датчики давления были установлены в плоскости земли вдоль радиуса, проходящего от точки инициализации детонации, на расстояниях 0.75, 1, 1.5, 2.25, 2.75, 3.25, 4.0, 5.0, 6.25 метров от нее. Схема эксперимента с расположением датчиков давления представлена на рисунке 1.

На рис. 2 показаны кадры высокоскоростной съемки. Инициализация детонации взрывчатым веществом массой 50 граммов (тип взрывчатого вещества не уточняется) хорошо видна на кадре 10.0 мс рис. 2. Вклад данного взрыва в скачок давления был оценен в другом эксперименте, в котором проводился подрыв такого же количества взрывчатки в воздухе, максимальное давление на датчике, расположенном на расстоянии 1.5 метра, составляло 1.82 атмосфер, на датчике на расстоянии 2.75 метра – 1.28 атмосфер. Данный вклад мал в сравнении с параметрами детонации Чепмена– Жуге в стехиометрической водородно-воздушной смеси и быстро релаксирует при отходе от точки взрыва. Энергия, высвобожденная взрывчатым веществом, составляет примерно 0.2% от общей энергии, полученной при взрыве всего объема с водородно-воздушной смесью.

Яркое свечение продуктов горения взрывчатого вещества наблюдается на всех кадрах на рис. 2. Полусферический фронт детонации начинает быть различим на кадрах от 10.2 до 13.2 мс, граница объема с горючей смесью достигается в момент времени 11.2 мс, после чего горячие продукты реакции расширяются радиально, приводя к раз-



Рис. 2. Фотосъемка эксперимента по прямой инициализации детонации при помощи высокоскоростной камеры. Кадры с шагом 0.2 миллисекунды [8].

рушению полиэтиленовой оболочки объема. Визуально измеренная скорость детонации составляет 1940 м/с, что соответствует теоретическим оценкам в 1955 м/с.

Верификация ПрЭВМ CABARET-COMBUSTION на задаче о детонации в сферической области

В расчете используется одна четверть от геометрии исходного эксперимента, что допустимо в силу осевой симметрии данной задачи. Для расчета используется кубическая расчетная область с размерами $8 \times 8 \times 8$ метров, на расчетной области введена равномерная сетка $250 \times 250 \times 250$, что составляет 15.625 млн расчетных ячеек, размер стороны каждой ячейки составляет 3.2 см. Начальные данные задаются в соответствии со спецификацией эксперимента [8]. Для инициализации детонации в области подрыва, находящейся в углу расчетной области и имеющей размеры $9.6 \times 9.6 \times 9.6$ см, задаются повышенное давление 50 атм и температура 3000 К.

На рис. 3 приведено поле плотности на различные моменты времени. На рисунке видны движение детонационной волны по водородно-воздушной смеси, ее выход в область, заполненную воздухом с переходом в ударную волну с дальнейшим затухани-ем последней.



Рис. 3. Поле плотности в расчете по ПрЭВМ CABARET-COMBUSTION на моменты времени 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80 мс.

На рис. 4 сопоставлены показания датчиков давления, расположенных внутри области, заполненной водородно-воздушной смесью. Расстояния от точки подрыва до датчиков составляют 0.75, 1.00, 1.50, 2.25, 2.75 метра. Схема расположения датчиков представлена на рис. 1. Также на рис. 4 показана траектория движения детонационной волны, построенная по точкам первого всплеска давления, соответствующим прохождению детонационной волны датчиков. По данной траектории вычислена скорость распространения детонационной волны в расчете — 1963 м/с, скорость детонационной волны, полученная в эксперименте составляет 1940 м/с, то есть скорость в расчете превышает экспериментальную менее чем на 1.5%.

На рис. 5 сопоставлены показания датчиков давления, расположенных снаружи области, заполненной водородно-воздушной смесью. Расстояния от точки подрыва до датчиков составляют 3.25, 4.00, 5.00 метра. Схема расположения датчиков представлена на рис. 1. Рис. 5 демонстрирует затухание ударной волны, созданной взрывом, по мере ее удаления от точки подрыва. Из рисунка видно, что на больших временах ударная волна в расчете заметно опережает экспериментально наблюдаемую, что объясняется различными скоростями волны детонации.



Рис. 4. Сравнение показаний датчиков давления в эксперименте и в расчете по ПрЭВМ CABARET-COMBUSTION для датчиков, расположенных внутри области, заполненной стехиометрической водородно-воздушной смесью.



Рис. 5. Сравнение показаний датчиков давления в эксперименте и в расчете по ПрЭВМ CABARET-COMBUSTION для датчиков, расположенных вне области, заполненной стехиометричсекой водородновоздушной смеси.

Описание кода CREBCOM, предназначенного для расчета горения и детонации топливо-воздушных смесей

Для описания различных режимов горения и соответствующих нагрузок разработан ряд компьютерных кодов и моделей. Разработанные в конце 20-го века компьютерные модели, такие как CREBCOM, DET3D, TONUS и другие, позволяют надежно рассчитывать нагрузки, возникающие в результате полностью развитой детонации.

Код CREBCOM [9] разработан для моделирования механических нагрузок, возникающих при различных режимах горения, включая медленное горение, быструю дефлаграцию и детонацию газовых смесей в замкнутых и частично открытых объемах сложной геометрии. Код создан для консервативной оценки нагрузок, которые могут возникать при горении в помещениях. Таким образом, CREBCOM предназначен для оценки максимального уровня нагрузок при горении в заданной конфигурации помещений и для заданных начальных условий (начальное давление и распределения температуры и концентраций компонентов смеси).

В 2000 г. код CREBCOM был верифицирован для расчета нагрузок на гермооболочку, элементы конструкции и оборудование внутри защитной оболочки АЭС при горении и взрыве водородсодержащих смесей. Код может использоваться при анализе безопасности АЭС в случае тяжелой аварии на стадии выделения значительных количеств водорода.



Рис. 6. Схема и габариты установки РУТ [10].

Кросс-верификационный расчет эксперимента KI-RUT-HYD09 с использованием кодов CABARET-COMBUSTION и CREBCOM

Установка РУТ представляет собой канал длиной 27.55 метра прямоугольного сечения с 2.5×2.25 метра, конец которого загибается под 90 градусов. В канале есть углубление, называемое каньоном, имеющим длину 10.6 метра и прямоугольное сечение 2.5×4 метра. Общий объем установки при этом составляет 263 м³. Схема установки представлена на рис. 6. На стенах канала и каньона расположены 12 датчиков давления, схема их установки представлена на рис. 7.

Для моделирования выбран эксперимент с детонацией однородной водородно-воздушной смеси KI-RUT-HYD9 [10]. В данном эксперименте объем установки заполняется 25.5% водородно-воздушной смесью при температуре 293 К и давлении 101 325 Па. Общая масса водорода в установке при этом составляет 5.579 кг.

Для расчета по коду CREBCOM используется равномерная расчетная сетка, состоящая из 3832192 кубических ячеек со стороной 6.66667 см, для расчета по коду CABARET-COMBUSTION используется неравномерная расчетная сетка, состоящая из 682728 шестигранных ячеек с характерным размером от 10 до 20 см, данная сетка представлена на рис. 8. В расчетах детонация инициируется путем задания высокого давления и температуры в точке В (рис. 6).

На рис. 9 показана эволюция поля давления в ходе расчета по ПрЭВМ CABARET-COMBUSTION. После инициализации в завернутом конце туннеля детонационная волна выходит в его основную часть, где распространяется в виде плоского фронта. Далее, по достижении каньона, детонационная волна начинает распространяться по нему в виде цилиндрической поверхности. Далее детонационная волна проходит оставшуюся часть тоннеля и каньона, отражается от стены и идет в противоположном



Рис. 7. Схема размещения датчиков давления на установке РУТ [10].



Рис. 8. Расчетная сетка, использованная при расчете по ПрЭВМ CABARET-COMBUSTION.



Рис. 9. Поле давления на различный моменты времени в расчете по ПрЭВМ CABARET-COMBUSTION.



Рис. 10. Сравнение показаний датчиков давления 7, 8, 9, 10, 11 для эксперимента и расчетов по CABARET-COMBUSTION и CREBCOM.

направлении в виде ударной волны. На рис. 10 сопоставлены показания датчиков давления 7, 8, 9, 10, 11 для экспериментальных данных и для результатов расчетов по кодам CABARET и CREBCOM. Из рисунка видно хорошее совпадение результатов расчетов с экспериментальными данными, некоторые расхождения обусловлены несколько разными скоростями распространения детонационной волны в используемых кодах. На рис. 11 сопоставлены скорости распространения детонационной волны вдоль канала. Максимальное относительное отклонение скорости детонационной волны составляет 2.5% для кода CABARET и 8% для кода CREBCOM. В целом оба расчетных алгоритма показывают хорошее совпадение с экспериментальными данными.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Надежное определение механических нагрузок, возникающих при горении водорода, является одной из наиболее важных проблем при анализе водородной безопасности и безопасности атомных электростанций (АЭС). В зависимости от состава образующейся смеси, ее размеров и геометрии, в защитной оболочке (ЗО) АЭС могут реализовываться различные режимы горения — от медленной дефлаграции, когда состав смеси близок к пределу воспламенимости, до перехода горения в детонацию (ПГД) и детонации.

Для описания различных режимов горения и соответствующих нагрузок был разработан ряд компьютерных кодов и моделей. Разработанные в последнее время компью-



Рис. 11. Сравнение скорости распространения детонационной волны вдоль длины установки РУТ для эксперимента и расчетов по CABARET-COMBUSTION и CREBCOM.

терные модели, такие как B02, DET3D, TONUS и другие, позволяют надежно рассчитывать нагрузки, возникающие в результате полностью развитой детонации.

Однако, разработка перспективных моделей и инструментов на основе CFD и их валидация на современных экспериментальных данных, полученных с высококачественной диагностикой, позволит увеличить прогнозные возможности численного моделирования и проводить анализ гипотетических аварий на качественно новом уровне. Применение вихреразрешающих подходов к моделированию турбулентности для обоснования безопасности ВЭ позволяет устранить неопределенности, возникающие при использовании полуэмпирических RANS-моделей турбулентности, основанных на решении осредненных по времени уравнений Навье-Стокса, и за счет этого повысить прогнозные возможности в части распространения водорода.

В работе проведена верификация расчетного кода CABARET-COMBUSTION, основанного на численной вихреразрешающей методике КАБАРЕ и предназначенного для расчета в том числе детонации перемешанных однородных и неоднородных водородно-воздушных смесей. В качестве материала для верификации используются экспериментальные данные, полученные на серии крупномасштабных экспериментов по детонации водородно-воздушных смесей в открытой полусфере и в замкнутом объеме сложной геометрии. Кроме того, проведена кросс-верификация расчетов по кодам CABARET-COMBUSTION и CREBCOM, являющимся одним из первых многомерных CFD-кодов для расчета процесса детонации. Проведенные верификационные исследования кода CABARET-COMBUSTION на данных экспериментов, направленных на изучение процессов, связанных с детонацией водорода и результаты кросс-верификации, показывают высокую точность соответствия расчетных и измеренных данных при условии учета определяющих процессов и использования достаточно подробной сеточной модели.

Данная работа является продолжением верификационных исследований серии расчетных кодов, основанных на численной методике КАБАРЕ.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [11].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Головизнин В.М., Зайцев М.А., Карабасов С.А. и др. Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов. М.: Изд-во МГУ им. М.В. Ломоносова, 2013. – 472 с.
- Большов Л.А., Глотов В.Ю., Головизнин В.М., Канаев А.А., Киселев А.Е., Юдина Т.А. Валидация кода CABARET-SC1 на экспериментах по водородной взрывобезопасности на АЭС // Атомная энергия. 2019. Т. 217(4). С. 198–203.
- 3. Варнати Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. 352 с.
- 4. *McBride B.J., Gordon S., Reno M.A.* Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species. National Aeronautics and Space Administration, 1993. NASA Technical Memorandum 4513.
- 5. JANAF Thermochemical Tables, 3rd Ed., J. Phys. Chem. Ref Data 14 (1985).
- 6. *Zhang Y., Liu Y.* Numerical simulation of hydrogen combustion: global reaction model and validation // Frontiers in energy research. 2017. V. 5. № 31. P. 1–12.
- 7. *Karabasov S., Goloviznin V.* Compact Accurately Boundary-Adjusting high-REsolution Technique for fluid dynamics // Journal of Computational Physics. 2009. V. 228. P. 7426–7451.
- Pfoertner H. Ausbreitungsfunktionen detonierender Wasserstoff-Luft Gemische, FhG-Projekt Nr. 102555, Fraunhofer-Institut fur Chemische Technologie, PfinztalBerghausen, Germany. December 1991.
- 9. Система кодов "СREBCOM". Верификационный отчет, РНЦ "Курчатовский институт", 2000.
- Yanez J. et al. A comparison exercise on the CFD detonation simulation in large scale confined volumes. International Journal of Hydrogen Energy. 2011. V. 36. P. 2613–2619.
- Воеводин Вл. В., Жуматий С.А., Соболев С.И., Антонов А.С., Брызгалов П.А., Никитенко Д.А., Стефанов К.С., Воеводин В.В. Практика суперкомпьютера "Ломоносов" // Открытые системы. - Москва: Издательский дом "Открытые системы", N 7, 2012. С. 36–39.

Detonation Modelling in a Large-Scale Facilities with Precision Eddy-Resolving Code Cabare-Combustion

A. I. Gavrikov^a, *, A. V. Danilin^a, A. A. Kanaev^a, and A. E. Kiselev^a

^aNuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia *e-mail: gavrikovandrev@vandex.ru

Verification of the CABARET-COMBUSTION code based on the CABARET numerical eddy-resolving technique and designed to calculate, among other things, the detonation of mixed homogeneous and inhomogeneous hydrogen-air mixtures, was carried out in this work. Experimental data obtained in a series of large-scale experiments on the detonation of hydrogen-air mixtures in an open hemisphere and in a closed volume of complex geometry are used as a verification base. Verification studies of the CABARET-COMBUSTION code on the experimental data focused at studying the processes associated with the detonation of hydrogen and the results of cross-verification show a high accuracy of agreement between the calculated and measured data, provided that the determining processes are taken into account and a sufficiently detailed grid is used.

Keywords: detonation, CFD code, verification, large scale experiments, cross verification