

ESTUDIO NUMÉRICO SOBRE EL DESACOPLAMIENTO FLUIDODINÁMICO/REACTIVO EN DETONACIONES METANO AIRE

A NUMERICAL STUDY ON THE DECOUPLING OF FLUID DYNAMIC/REACTIVE FRONT IN METHANE-AIR DETONATIONS

Luis F. Gutiérrez Marcantoni^{a,c}, José P. Tamagno^a y Sergio A. Elaskar^{a,b}

^aDpto. Aeronáutica, Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina, lfgmarcantoni@unc.edu.ar, <http://www.dep.aeronautica.efn.uncor.edu/>

^bInstituto de Estudios Avanzados en Ingeniería y Tecnología (IDIT), CONICET y Universidad Nacional de Córdoba, Argentina, selaskar@unc.edu.ar, <http://www.inv.idit.efn.uncor.edu/>

^cUniversidad Católica de Córdoba, Facultad de Ingeniería, Córdoba, Argentina, <https://www2.ucc.edu.ar/facultades/ingenieria/>

Palabras clave: detonación, cinética química, OpenFOAM, metano

Resumen. Se presentan resultados que verifican cómo el uso de modelos cinéticos simplificados conduce a resultados incorrectos en la simulación de procesos detonantes en mezclas de metano-aire. Para esto se utiliza un modelo numérico basado en volúmenes finitos desarrollado con la estructura de datos ofrecida por OpenFOAM que emplea el esquema de Kurganov para discretizar a los términos convectivos y un algoritmo del tipo paso fraccionado. Como caso patrón se simula una detonación plana, inicialmente en estado *overdriven*, y se observa como esta experimenta una transición hacia un estado de desacoplamiento a medida que el modelo cinético describe una mejor aproximación al proceso real, mientras que con modelos simplificados se obtienen resultados que conducen a una clara sobre estimación de los parámetros típicos del fenómeno.

Keywords: detonation, chemical kinetics, OpenFOAM, methane.

Abstract. Here are presented numerical results that verify how the use of simplified chemical kinetics models in the simulation of detonation processes in methane-air mixtures leads to wrong results. Numerical simulations were performed by a finite volume solver developed on the data structure of the OpenFOAM package. All convective terms are discretized with the Kurganov scheme, and the system time evolution is performed by using a fractional step approach. For studying the influence of the chemical modeling on the uncoupling between the fluid-dynamic and reactive fronts, an initially overdriven detonation is simulated with different kinetic mechanisms. It is observed that as the chemical model is simplified an overprediction of the typical detonation parameters is achieved.