

# О МЕХАНИЗМЕ ПЕРЕХОДА МЕДЛЕННОГО ГОРЕНИЯ В ДЕТОНАЦИЮ В ВОДОРОД-КИСЛОРОДНОЙ СМЕСИ

*М. А. Либерман*<sup>a,b,\*</sup>, *М. Ф. Иванов*<sup>c</sup>, *А. Д. Киверин*<sup>c</sup>,  
*М. С. Кузнецов*<sup>d,\*\*</sup>, *Т. В. Рахимова*<sup>b</sup>, *А. А. Чукаловский*<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Department of Physics, Uppsala University  
SE-75121, Uppsala, Sweden*

<sup>b</sup> *Институт ядерной физики Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова  
119992, Москва, Россия*

<sup>c</sup> *Объединенный институт высоких температур Российской академии наук  
125412, Москва, Россия*

<sup>d</sup> *Forschungszentrum Karlsruhe, 76021, Karlsruhe, Germany*

Поступила в редакцию 15 марта 2010 г.

Ускорение пламени и физический механизм, обуславливающий переход медленного горения в детонацию, исследованы экспериментально, теоретически и с помощью двумерной газодинамической модели для водород-кислородной газовой смеси с учетом кинетики цепных химических реакций для восьми компонент. Показано, что ускоряющееся в трубе пламя генерирует ударные волны, которые перед самым переходом в детонацию образуются непосредственно на фронте пламени, создавая слой сжатого газа, примыкающий к фронту пламени. Смесь с плотностью, большей плотности исходного газа, поступает во фронт пламени, нагревается и вступает в реакцию. В результате на фронте пламени образуется пик давления большой амплитуды. Увеличение давления и плотности на переднем крае фронта пламени ускоряет химическую реакцию, приводя к усилению волны сжатия и экспоненциально быстрому росту пика давления, который «тащит» пламя за собой. Волна сжатия большой амплитуды образует сильную ударную волну прямо перед зоной реакции, формируя волну детонации. Теория и численное моделирование ускорения пламени и нового физического механизма перехода горения в детонацию полностью согласуются с экспериментально наблюдаемыми особенностями ускорения пламени, образованием ударных волн и переходом горения в детонацию в водород-кислородной газовой смеси.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Волна химической реакции в газовой смеси является одним из наиболее фундаментальных проявлений распространения экзотермической реакции и занимает центральное место в изучении процессов горения. Как известно [1], возможны два стационарных режима распространения волны горения в газовой смеси: медленное горение (дефлаграция) и сверхзвуковая волна детонации. Волна дефлаграции распространяется за счет диффузии тепла и (или) свободных радикалов из зоны реакции в свежую смесь перед фронтом, так что ее скорость много

меньше скорости звука и давление практически постоянное. Другой, сверхзвуковой, механизм распространения волны горения связан с ударными волнами. В волне детонации газ сжимается и нагревается сильной ведущей ударной волной, поджигающей газовую смесь. Известно [2–5], что при распространении пламени в ограниченном пространстве, например в ударной трубе, скорость пламени постепенно увеличивается и на некотором расстоянии от места зажигания происходит внезапное, очень быстрое образование детонации. Переход от горения к детонации (deflagration-to-detonation transition) представляет фундаментальный интерес как спонтанный переход между двумя стационарными решениями полной системы уравнений газовой динамики. Вы-

\*E-mail: misha.liberman@gmail.com

\*\*E-mail: mike.kuznetsov@kit.edu

яснение физических процессов определяющих переход горения в детонацию (ПГД) важно как для понимания способов предотвращения детонации в связи с проблемами безопасности АЭС, для хранения водорода и для водородных двигателей [6–8], так и инициирования детонации для разработки импульсно-детонационных двигателей [9], а также в астрофизике для объяснения взрыва термоядерных Сверхновых [10, 11].

Несмотря на многолетние экспериментальные и теоретические исследования, физический механизм ПГД до сих пор неясен и рассматривается как одна из наиболее важных нерешенных проблем в теории горения. Первые попытки объяснить ПГД предполагали, что турбулентность потока перед фронтом ускоряет пламя так, что сильные ударные волны, образующиеся перед пламенем, приводят к самовоспламенению смеси и образованию волны детонации. Это представление основывалось на известных экспериментах Щелкина с сотрудниками [4, 12, 13], в которых с помощью спиралей создавалась сильная турбулентность потока перед пламенем, ускоряющая пламя и существенно сокращающая время образования детонации. Сильная турбулентность упрощает наблюдение ПГД, однако существенно маскирует физические процессы, обуславливающие переход от одного режима к другому. Эксперименты показывают, что переход медленного горения в детонацию в быстрореагирующих смесях, например водород–кислород, водород–воздух и т. д., происходит так, что течение в трубе перед пламенем остается ламинарным, вплоть до образования волны детонации. Следует отметить, что сам по себе взрыв газовой смеси не может инициировать детонацию, поскольку получаемое во взрыве давление много меньше давления за ведущей ударной волной с типичным для детонации числом Маха  $M_{sh} = 5-6$ .

Используя одномерную численную модель, Зельдович с сотрудниками [14] показали, что детонация может быть инициирована заданным начальным неравномерным распределением температуры. Идея градиентного механизма, предложенного в работе [14], основана на концепции спонтанной волны горения [15], предложенной Зельдовичем. Если в начальный момент смесь нагрета неравномерно с распределением температуры  $T(x)$ , то воспламенение начинается в точках, где температура выше (а время индукции  $\tau_{ind}(T)$  соответственно меньше), и затем распространяется в виде спонтанной волны горения со скоростью  $U_{sp}(x) = [d\tau_{ind}(T)/dx]^{-1}$  вдоль градиента температуры. Скорость спонтанной волны горения может быть произвольно большой в за-

висимости от градиента температуры. В частности, если скорость спонтанной волны горения становится равной скорости Чепмена–Жуге, то возможно образование детонации [15]. С использованием численных решений одномерных газодинамических задач была проведена подробная классификация режимов спонтанной волны горения с различными заданными распределениями температур [16–20]. После работ [14, 15] градиентный механизм Зельдовича рассматривался как наиболее естественный механизм, объясняющий переход горения в детонацию. Нужно заметить, что инициирование детонации градиентом температуры было продемонстрировано только в одномерных численных расчетах, где начальная неоднородность температуры задавалась искусственно [14–20]. В настоящее время не существует ни экспериментальных данных, ни многомерных численных расчетов с реальной химической кинетикой, показывающих, что механизм перехода горения в детонацию действительно обусловлен образованием температурного градиента или градиента времени индукции. До настоящего времени остается нерешенным также принципиальный вопрос о том, как может образоваться градиент температуры и какие физические процессы приводят к включению градиентного механизма, если считать, что физический механизм ПГД действительно связан с образованием градиента температуры.

В течение последних 20 лет ПГД исследовался в многочисленных работах с помощью дву- и трехмерного численного моделирования с целью выяснения механизма ПГД и того, какие процессы приводят к образованию градиента температуры (см. обзор [21]). В работах по численному моделированию авторы использовали одноступенчатую модель химической реакции с низкой энергией активации для моделирования ПГД в смесях водород–воздух, ацетилен–воздух и т. п. и пришли к выводу, что градиент температуры, включающий механизм Зельдовича, и переход к детонации возникают в горячих точках, образующихся перед фронтом пламени на пересечении отраженных от стенок трубы ударных волн. На самом деле реальное время индукции (время воспламенения смеси) для температур 600–800 К в горячих точках, полученное в [21], на четыре-пять порядков больше времени всего процесса от горения до перехода в детонацию даже для наиболее быстро реагирующих смесей, таких как водород–кислород. Поэтому остается открытым вопрос о применимости результатов, полученных в работе [21], к ПГД в быстро реагирующих смесях.

В настоящей работе показано, что физические

процессы, приводящие к ПГД, могут быть значительно сложнее, чем считалось ранее. В настоящей работе приведены экспериментальные результаты для динамики ускорения волны горения и ПГД для водород-кислородных смесей при разных начальных давлениях. Аналогичные экспериментальные результаты были получены также для этилен-кислородных смесей [22]. Механизм ПГД исследуется с помощью численного решения двумерных уравнений газодинамики совместно с уравнениями кинетики основных химических реакций для водород-кислородной смеси. Следует подчеркнуть, что экспериментально доступное временное разрешение скоростной теневой фотографии (0.1–0.01 мс) недостаточно для того, чтобы разрешить быстрый процесс ПГД, и в этом смысле численный эксперимент, дополняющий реальный физический эксперимент, позволяет увидеть детали и понять физический механизм ПГД.

## 2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПЕРЕХОДА ГОРЕНИЯ В ДЕТОНАЦИЮ

Эксперименты по ПГД в стехиометрической водород-кислородной смеси проводились в ударных трубах, изготовленных из нержавеющей стали с прямоугольным сечением  $50 \times 50$  мм<sup>2</sup>, длиной от 3.4 до 6.065 м при начальных давлениях смеси от 0.2 до 0.75 бар. Скорости пламени и ударных волн измерялись с помощью метода скоростной теневой (Schlieren) фотосъемки с временным разрешением 0.1 мс. Пространственное разрешение 200 мкм позволяет отчетливо различать слабые волны сжатия, их пересечение и отражение от стенок трубы и т. д. Соответственно точность измерения скоростей составляла  $\pm 2$  м/с. Калиброванные датчики для измерения давления и фотодиоды, расположенные вдоль оси трубы, регистрировали времена прихода фронтов пламени и ударной волны в данную точку. Конструкция установки и диагностическая аппаратура, оптическая схема, стробоскопический генератор, скоростная фотокамера и методы измерений скорости описаны в работах [22–24].

Смесь поджигалась электрической искрой вблизи закрытого конца трубы, и образовавшаяся волна горения распространялась к противоположному концу. Длина трубы выбиралась достаточно большой, чтобы отраженные от противоположного конца ударные волны не успевали вернуться к пламени и, по возможности, не влияли на процесс перехода.

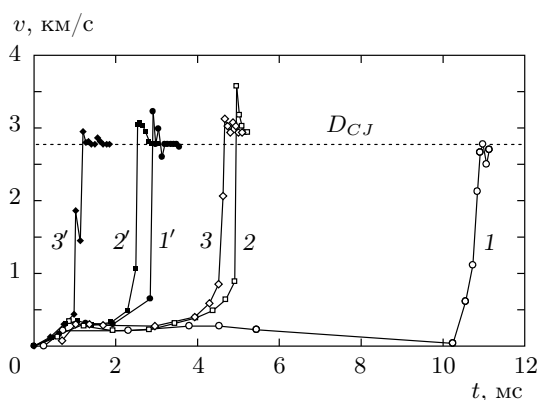
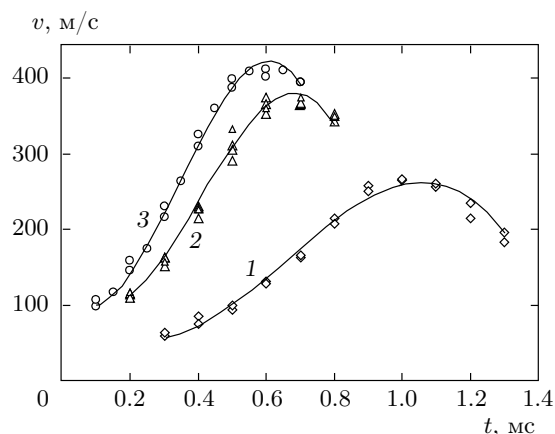


Рис. 1. Изменение со временем скорости волны горения в водород-кислородной смеси при начальных давлениях 0.5 бар (кривые 1, 1'), 0.6 бар (кривые 2, 2'), 0.75 бар (кривые 3, 3'), в трубе с шероховатостью стенок  $d \leq 50$  мкм (1, 2, 3) и  $d = 1000$  мкм (1', 2', 3'),  $D_{СЖ}$  — скорость Чепмена–Жуге

Измеренные в экспериментах зависимости скорости волны горения от времени для различных начальных давлений и для разной степени шероховатости стенок трубы от момента зажигания до образования детонации Чепмена–Жуге представлены на рис. 1. Во всех экспериментах наблюдались четко различимые три стадии распространения волны горения вдоль трубы. На первой стадии в течение малого времени (меньше 1 мс) пламя движется с почти постоянным ускорением. На второй стадии волна горения продолжает ускоряться, но медленнее, чем в течение первой стадии. Третья стадия — это быстрое, почти скачкообразное, увеличение скорости до скорости пересажатой волны детонации, которая затем переходит в детонацию Чепмена–Жуге. Следует уточнить, что на рис. 1 и ниже на рис. 2 показана локальная скорость точки фронта пламени на оси трубы.

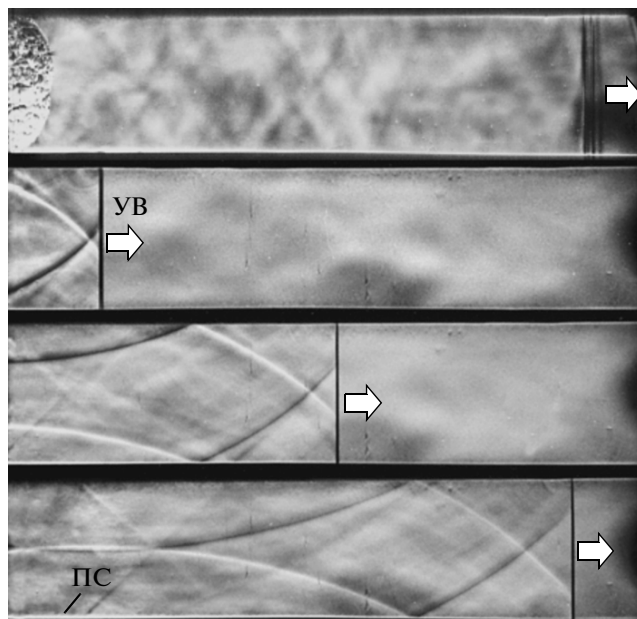
Поскольку глобальный порядок реакции для водород-кислородной смеси составляет  $n = 2.73$ , скорость реакции и скорость ламинарного пламени растут с давлением [2]. Нормальная скорость ламинарного пламени возрастает от 6.8 до 8.9 м/с при изменении давления от 0.2 до 0.75 бар. При этом видимая скорость пламени, т. е. скорость в лабораторной системе координат, возрастает от 55 до 74 м/с. В конце первой стадии видимая скорость пламени равна 375 м/с при начальном давлении  $P_0 = 0.6$  бар и 420 м/с при  $P_0 = 0.75$  бар. В конце второй стадии, непосредственно перед образованием детонации, видимая скорость пламени достигает 850–900 м/с. Из



**Рис. 2.** Зависимость скорости пламени от времени в водород-кислородной смеси на начальной стадии распространения пламени в трубе при начальных давлениях  $P_0 = 0.2$  бар (кривая 1,  $v = 29 \exp(3.75t/\text{мс})$ ),  $0.6$  бар (2,  $v = 59 \exp(3.27t/\text{мс})$ ),  $0.75$  бар (3,  $v = 70 \exp(2.5t/\text{мс})$ ); размерность предэкспоненциальных множителей везде м/с

рис. 1 также видно, что при одинаковом начальном давлении расстояние, проходимое пламенем до перехода в детонацию, тем меньше, чем больше шероховатость стенок трубы. Более подробные измерения, результаты которых приведены на рис. 2, показывают, что скорость пламени на первой стадии с большой точностью аппроксимируется экспоненциальной зависимостью от времени. Такая же динамика, состоящая из трех четко различимых стадий ускорения пламени, наблюдается для ПГД в этилен-кислородных смесях, для которых глобальный порядок реакции равен  $n = 1.9-2.0$ . Таким образом, наблюдаемая динамика ускорения пламени в трубах и ПГД являются характерными по крайней мере для быстро реагирующих смесей.

Видимое на рис. 1, 2 уменьшение скорости при  $t = 0.5-0.7$  мс наблюдается при низких начальных давлениях смеси (ниже  $0.75$  атм для  $\text{H}_2\text{-O}_2$ ). Чтобы избежать недоразумений, следует подчеркнуть, что речь идет об уменьшении локальной скорости фронта пламени, измеренной на оси трубы. Уменьшение скорости на оси связано с началом образования тюльпанообразной формы фронта пламени (как видно из приведенных ниже на рис. 3, 4 теневых фотографий), когда точки фронта на оси отстают, а лепестки тюльпана движутся быстрее. Скорость же волны горения, которая определяется потоком сгоревшего газа, проходящим через поверх-



**Рис. 3.** Теневые фотографии начальной стадии ускорения пламени,  $P_0 = 0.75$  бар. Начиная от верхнего кадра, время, положения и скорости фронта пламени и ударной волны (УВ) соответственно равны  $t = 0.75, 1.3, 1.4, 1.5$  мс,  $X_f = 229, 371, 410, 452$  мм,  $U_f = 350, 370, 390, 420$  м/с,  $X_{sh} = 420, 826, 903, 980$  мм,  $M_{sh} = 1.48-1.5$ . Пограничный слой (ПС) везде меньше  $1.5$  мм

ность фронта пламени и отнесенным к поперечному сечению трубы, является интегральной характеристикой, определяющей динамику пламени. Эта скорость растет монотонно, но темп ее роста меньше, чем на первой стадии ускорения. Это подтверждается тем, что волны сжатия образуют ударные волны не далеко впереди, а непосредственно перед фронтом пламени (см. разд. 5). Уменьшение скорости почти до нуля для  $P_0 = 0.5$  бар при  $t = 10$  мс (кривая 1 на рис. 1) связано с взаимодействием пламени со встречной ударной волной, отраженной от противоположного конца трубы.

На теневых фотографиях, приведенных на рис. 3, видна форма фронта пламени и лидирующая ударная волна в водород-кислородной смеси при начальном давлении  $P_0 = 0.75$  бар. На верхнем кадре, в момент  $t = 0.75$  мс, слева виден фронт пламени, а справа наблюдается ударная волна на расстоянии около пяти ширин трубы. Белая полоса в нижней части кадра — это пограничный слой в области между ударной волной и фронтом пламени. Толщина пограничного слоя составляет вначале около  $1$  мм и не превышает  $5$  мм вблизи

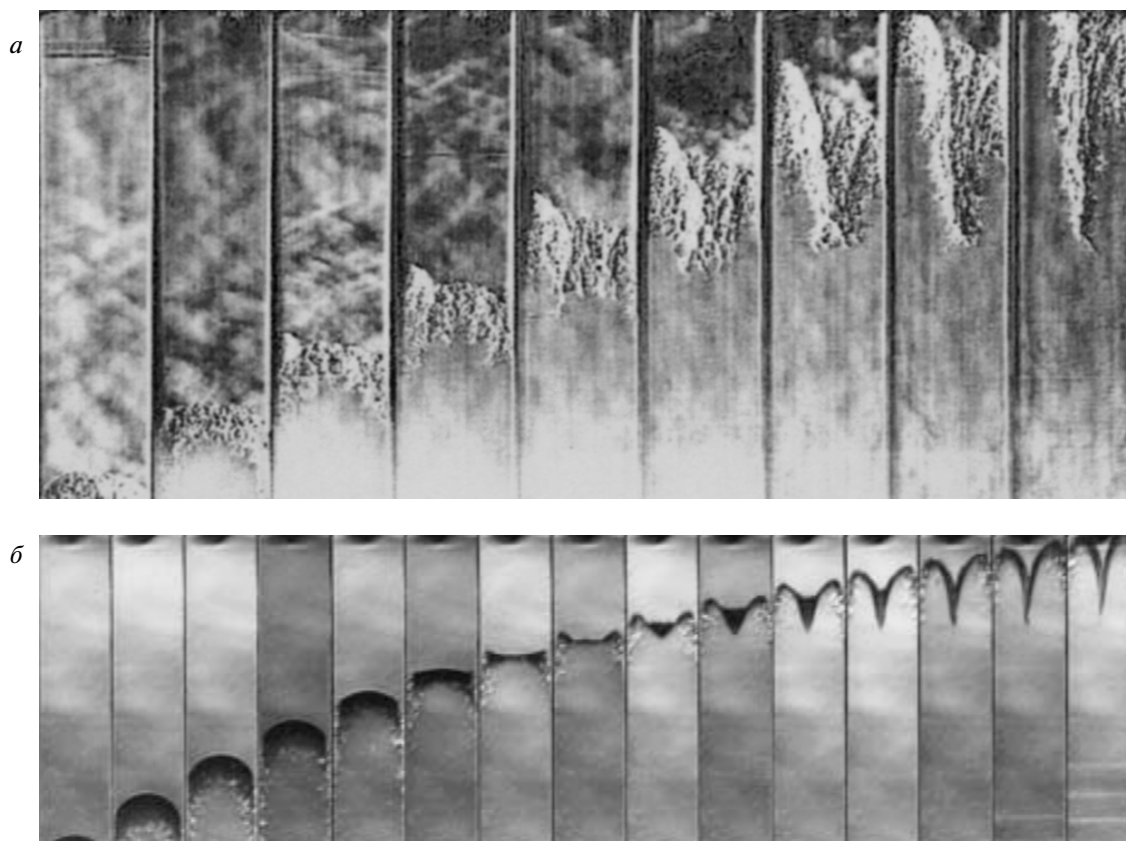


Рис. 4. Теневые фотографии, показывающие эволюцию формы фронта и скорости пламени при начальном давлении  $P_0 = 0.75$  бар, шероховатости стенок  $d = 50$  мкм (*а*) и  $P_0 = 0.2$  бар,  $d = 1000$  мкм (*б*). Время, координаты и скорость пламени для каждого кадра приведены в табл. 1 и 2

фронта пламени вплоть до возникновения детонации, что значительно меньше ширины трубы. На последующих кадрах, сделанных при  $t = 1.3, 1.4, 1.5$  мс, видны слабые волны сжатия, произведенные ускоряющимся пламенем, их отражение от стенок трубы и течение перед фронтом пламени за ведущей ударной волной. Видно, что течение между ударной волной и фронтом пламени остается ламинарным и однородным в основной части поперечного сечения трубы, не считая слабых волн сжатия и тонкого пограничного слоя.

Эволюция формы фронта пламени при переходе от первой ко второй стадии ускорения показаны на теневых фотографиях, приведенных на рис. 4 для начальных давлений смеси  $P_0 = 0.75, 0.2$  бар. Координаты и скорости пламени и ударной волны (числа Маха) на рис. 4 для каждого момента времени приведены в табл. 1 и 2. Характерной особенностью, которая отчетливо видна при более низком начальном давлении на рис. 4б, является вытягивание фронта пламени вдоль стенок трубы, в результа-

те чего возникает узкая щель между поверхностью фронта и стенкой трубы. При этом вначале общая поверхность фронта пламени увеличивается, соответственно увеличивается скорость волны горения. В конце первой стадии ускорения, длительность которой зависит от начального давления (0.4 мс для  $P_0 = 0.75$  бар и 0.9 мс для  $P_0 = 0.2$  бар), глубина щели между фронтом пламени и стенкой уменьшается, фронт пламени становится почти плоским, его поверхность уменьшается и соответственно уменьшается темп роста скорости. Числа Маха для ударных волн далеко перед пламенем остаются в диапазоне  $M_{sh} = 1.3-1.5$ .

На рис. 5 приведены теневые фотографии последней, третьей, стадии непосредственно перед образованием детонационной волны. Поскольку переход в детонацию является стохастическим процессом, точное место зарождения детонации заранее не известно. На рис. 5 показан один из сценариев образования детонации вблизи стенки трубы. Аналогичные фотографии были получены в случаях, когда

Таблица 1. Координаты и скорость пламени и ударной волны на рис. 4а ( $\Delta$  — толщина пограничного слоя)

	$t$ , мс								
	0.65	0.75	0.85	0.95	1.05	1.15	1.25	1.35	1.45
$X_f$ , мм	194	229	259	287	316	346	374	401	410
$U_f$ , м/с	—	350	330	305	290	300	280	275	225
$X_{sh}$ , мм	194	420	500	581	662	743	823	904	985
$M_{sh}$	1.54	1.54	1.54	1.54	1.54	1.54	1.54	1.54	1.54
$\Delta$ , мм	—	2.6	2.4	3.0	3.3	3.3	3.0	3.2	3.5

Таблица 2. Координаты и скорость пламени на рис. 4б

	$t$ , мс															
	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.0
$X_f$ , мм	121	149	179	206	231	252	267	281	294	307	320	330	340	350	358	—
$U_f$ , м/с	—	280	300	270	245	210	150	140	130	130	120	104	104	93	85	—

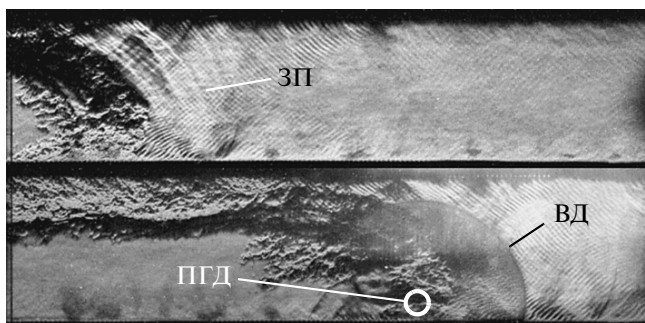


Рис. 5. Образование сжатого слоя несгоревшего газа примыкающего к фронту пламени и переход в детонацию. Начальное давление  $P_0 = 0.55$  бар. Верхняя фотография —  $t = 3.3$  мс,  $X_f = 1143$  мм,  $U_f = 997$  м/с,  $X_{sh} = 1163$  мм,  $M_{sh} = 2.3$  мм. Нижняя фотография —  $t = 3.4$  мс, ПГД уже произошел (ЗП — зона преднагрева, ВД — волна детонации)

детонация зарождалась вблизи оси трубы. На верхнем кадре на рис. 5 при 3.3 мс виден сжатый слой газа между фронтом пламени и ударной волной с числом Маха  $M_{sh} = 2.3$ . На следующем кадре, полученном через 0.1 мс, ПГД уже произошел и видна волна детонации. Следует отметить, что в конце второй стадии ускорения ударные волны образуются непосредственно вблизи фронта пламени в отличие от начальной стадии ускорения, когда волны сжатия образуют ударные волны на расстояниях порядка

десяти ширин канала. Наиболее важная особенность второй стадии ускорения пламени заключается в образовании ударной волной слоя сжатого и нагретого газа, примыкающего спереди к фронту пламени. Он виден на верхнем рис. 5 как более светлая полоса шириной около 10 мм.

Плотность и температура внутри сжатого слоя перед фронтом пламени в момент ПГД зависят от интенсивности образующих сжатый слой ударных волн. Для измеренных в экспериментах чисел Маха  $M_{sh} = 2-2.3$ , плотность возрастает в  $\rho_2/\rho_0 = 3-3.5$  раза ( $\rho_2$  и  $\rho_0$  — плотности за ударной волной и перед ней), а температура внутри слоя — от 550 до 700 К. Именно образование примыкающего к фронту пламени слоя сжатой и нагретой ударными волнами смеси является ключевым фактором, определяющим ПГД. Как будет показано в численном эксперименте, масштаб процессов, обуславливающих ПГД, меньше или порядка микросекунды, т. е. на два-три порядка меньше, чем временное разрешение между кадрами теневых фотографий. В этом смысле численный эксперимент дополняет физический эксперимент, позволяя понять природу ПГД и физические процессы, характерные для этого перехода. Эту особенность динамики течения при ПГД можно видеть уже на теневых фотографиях в ранних экспериментальных работах [25–27], хотя этому не было уделено должного внимания.

### 3. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ДВУМЕРНОГО ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В двумерном численном моделировании исследуются динамика пламени, распространяющегося от закрытого к открытому концу двумерного канала, и ПГД. Граничные условия на стенках канала требуют обращения в нуль скорости внутри вязкого пограничного слоя на стенках. В настоящей работе основное внимание уделялось физическим процессам, определяющим механизм ПГД в трубе с гладкими стенками. Численно решается система уравнений Навье–Стокса для сжимаемой среды с учетом вязкости, теплопроводности, многокомпонентной диффузии и энергосвободы в химических реакциях R1–R9, приведенных в табл. 3.

Уравнения газовой динамики в эйлеровых переменных имеют вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial z} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + u \frac{\partial C_i}{\partial x} + v \frac{\partial C_i}{\partial z} = \frac{1}{\rho} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \rho D_i \frac{\partial C_i}{\partial z} \right) \right] + \left( \frac{\partial C_i}{\partial t} \right)_{ch}, \quad (2)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial z} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z}, \quad (3)$$

$$\rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial z} \right) = - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z}, \quad (4)$$

$$\rho \left( \frac{\partial E}{\partial t} + u \frac{\partial E}{\partial x} + v \frac{\partial E}{\partial z} \right) = - \left( \frac{\partial(pu)}{\partial x} + \frac{\partial(pv)}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial x} (\sigma_{xx}u + \sigma_{xz}v) + \frac{\partial}{\partial z} (\sigma_{zx}u + \sigma_{zz}v) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \kappa(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \sum_k h_k \times \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho D_k(T) \frac{\partial C_k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \rho D_k(T) \frac{\partial C_k}{\partial z} \right) \right], \quad (5)$$

$$P = R_B T n = \left( \sum_i \frac{R_B}{m_i} C_i \right) \rho T = \rho T \sum_i R_i C_i, \quad (6)$$

$$\varepsilon = c_v T + \sum_k \frac{h_k \rho_k}{\rho} = c_v T + \sum_k h_k C_k, \quad (7)$$

$$\sigma_{xx} = 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial z} \right), \quad (8)$$

$$\sigma_{zz} = 2\mu \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{2}{3}\mu \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial z} \right), \quad (9)$$

$$\sigma_{zx} = \sigma_{xz} = \mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right). \quad (10)$$

Здесь  $P$ ,  $\rho$ ,  $u$  и  $v$  — соответственно давление, плотность,  $x$ - и  $z$ -компоненты скорости,  $C_i = \rho_i/\rho$  — массовые концентрации компонент смеси, участвующих в реакции, плотность полной энергии смеси  $E = \varepsilon + (u^2 + v^2)/2$ ,  $\varepsilon$  — плотность внутренней энергии,  $R_B$  — универсальная газовая постоянная,  $R_i = R_B/m_i$ ,  $m_i$  — молярная масса  $i$ -й компоненты,  $n$  — молярная плотность смеси,  $\sigma_{ij}$  — тензор вязких напряжений,  $c_v = \sum_i c_{vi} C_i$  — удельная теплоемкость смеси при постоянном объеме,  $c_{vi}$  — удельная теплоемкость  $i$ -й компоненты при постоянном объеме,  $h_i$  — удельная энтальпия образования  $i$ -й компоненты,  $\kappa(T)$  и  $\mu(T)$  — коэффициенты теплопроводности и вязкости смеси,  $D_i(T)$  — коэффициент диффузии  $i$ -й компоненты в смеси,  $(\partial C_i/\partial t)_{ch}$  — изменение концентрации  $i$ -й компоненты за счет химических реакций.

Коэффициенты переноса и уравнения состояния несгоревшей смеси и продуктов горения соответствовали параметрам реальных смесей. Уравнение состояния смеси определялось по зависимости теплоемкостей отдельных компонент смеси от температуры, которая определялась из теплофизических таблиц JANAF путем интерполяции полиномами пятого порядка [28], коэффициенты переноса рассчитывались на основании кинетической теории газов [29, 30]. Коэффициент вязкости газовой смеси определялся соотношением

$$\mu = \frac{1}{2} \left[ \sum_i \alpha_i \mu_i + \left( \sum_i \frac{\alpha_i}{\mu_i} \right)^{-1} \right], \quad (11)$$

где  $\alpha_i = n_i/n$  — молярная доля,  $\mu_i = 5\sqrt{\pi \hat{m}_i k T} / 16\pi \Sigma_i^2 \tilde{\Omega}_i^{(2,2)}$  — коэффициент вязкости  $i$ -й компоненты,  $\tilde{\Omega}_i^{(2,2)}$  — приведенный интеграл столкновений, вычисляемый для потенциала Ленарда-Джонса [30],  $\hat{m}_i$  — масса молекулы  $i$ -й компоненты,  $\Sigma_i$  — эффективный размер молекулы. Аналогичным образом определяется коэффициент теплопроводности для смеси:

$$\kappa = \frac{1}{2} \left[ \sum_i \alpha_i \kappa_i + \left( \sum_i \frac{\alpha_i}{\kappa_i} \right)^{-1} \right]. \quad (12)$$

При этом коэффициент теплопроводности  $\kappa_i$   $i$ -й компоненты выражается через соответствующий коэффициент вязкости и число Прандтля ( $Pr \approx 0.71-0.75$ ), слабо меняющееся для газов,  $\kappa_i = \mu_i c_{pi} / Pr$ , где  $c_{pi}$  — удельная теплоемкость  $i$ -й компоненты при постоянном давлении.



**Таблица 3.** Редуцированная схема реакций горения водород-кислородной смеси, предэкспоненциальные множители и энергии активации для прямых ( $f$ ) и обратных ( $b$ ) скоростей реакций ( $M$  — любая частица, которой передается избыточная энергия)

Реакция		$A_f$ , см <sup>3</sup> /моль·с	$E_{a_f}$ , ккал/моль	$A_b$ , см <sup>3</sup> /моль·с	$E_{a_b}$ , ккал/моль
R1	$H_2 + O_2 = 2OH$	$2.52 \cdot 10^{12}$	39.0	$1.16 \cdot 10^{13}$	21.0
R2	$OH + H_2 = H_2O + H$	$2.25 \cdot 10^{13}$	5.24	$9.90 \cdot 10^{13}$	20.3
R3	$H + O_2 = OH + O$	$1.55 \cdot 10^{14}$	16.7	$1.16 \cdot 10^{13}$	0.705
R4	$H_2 + O = OH + H$	$2.46 \cdot 10^{13}$	9.84	$1.07 \cdot 10^{13}$	7.90
R5	$2H + M = H_2 + M$	$3.60 \cdot 10^{15}$	0.0	$1.46 \cdot 10^{16}$	104.0
R6	$H + O_2 + M = HO_2 + M$	$3.60 \cdot 10^{15}$	0.0	$3.01 \cdot 10^{15}$	47.8
R7	$2HO_2 = H_2O_2 + O_2$	$1.0 \cdot 10^{13}$	0.0	$1.30 \cdot 10^{14}$	40.0
R8	$2OH + M = H_2O_2 + M$	$1.11 \cdot 10^{16}$	1.92	$7.40 \cdot 10^{17}$	47.0
R9	$H + H_2O_2 = H_2 + HO_2$	$1.17 \cdot 10^{14}$	11.8	$1.55 \cdot 10^{14}$	28.5

Коэффициент диффузии  $i$ -й компоненты в многокомпонентной среде определялся как

$$D_i = (1 - C_i) \left( \sum_{i \neq j} \frac{\alpha_i}{D_{ij}} \right)^{-1}, \quad (13)$$

где

$$D_{ij} = \frac{3\sqrt{2\pi kT \hat{m}_i \hat{m}_j / (\hat{m}_i + \hat{m}_j)}}{8\rho\pi\Sigma_{ij}^2 \tilde{\Omega}^{(1,1)}(T_{ij}^*)}$$

— коэффициент бинарной диффузии,  $\Sigma_{ij} = (\Sigma_i + \Sigma_j)/2$ ,  $T_{ij}^* = kT/\varepsilon_{ij}^*$ ,  $\varepsilon_{ij}^* = \sqrt{\varepsilon_i^* \varepsilon_j^*}$ ,  $\varepsilon^*$  — константа, входящая в потенциал Ленарда-Джонса, величина  $\tilde{\Omega}_{ij}^{(1,1)}$  является аналогом интеграла столкновений  $\tilde{\Omega}^{(2,2)}$  [29, 30].

Кинетика горения водород-кислородной смеси описывалась редуцированной схемой из девяти реакций [31], представленной в табл. 3. Выбранная редуцированная схема является достаточно экономичной по числу включенных в нее уравнений. Достоверность использованной системы уравнений химической кинетики подтверждается хорошим согласием с экспериментальными данными для нормальной скорости, ширины фронта пламени, адиабатической температуры и состава продуктов горения.

Величины концентраций  $C_i$  образующих смесь компонент находились из решения системы уравнений химической кинетики

$$\frac{dC_i}{dt} = F_i(C_1, C_2, \dots, C_N, T), \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (14)$$

Правые части уравнений (14) содержат скорости химических реакций, зависящие от температуры по за-

кону Аррениуса, представленные в стандартном виде [29]. Скорости прямой  $k_f(T)$  и обратной  $k_b(T)$  реакций, связанные между собой принципом детального равновесия, заданы в виде

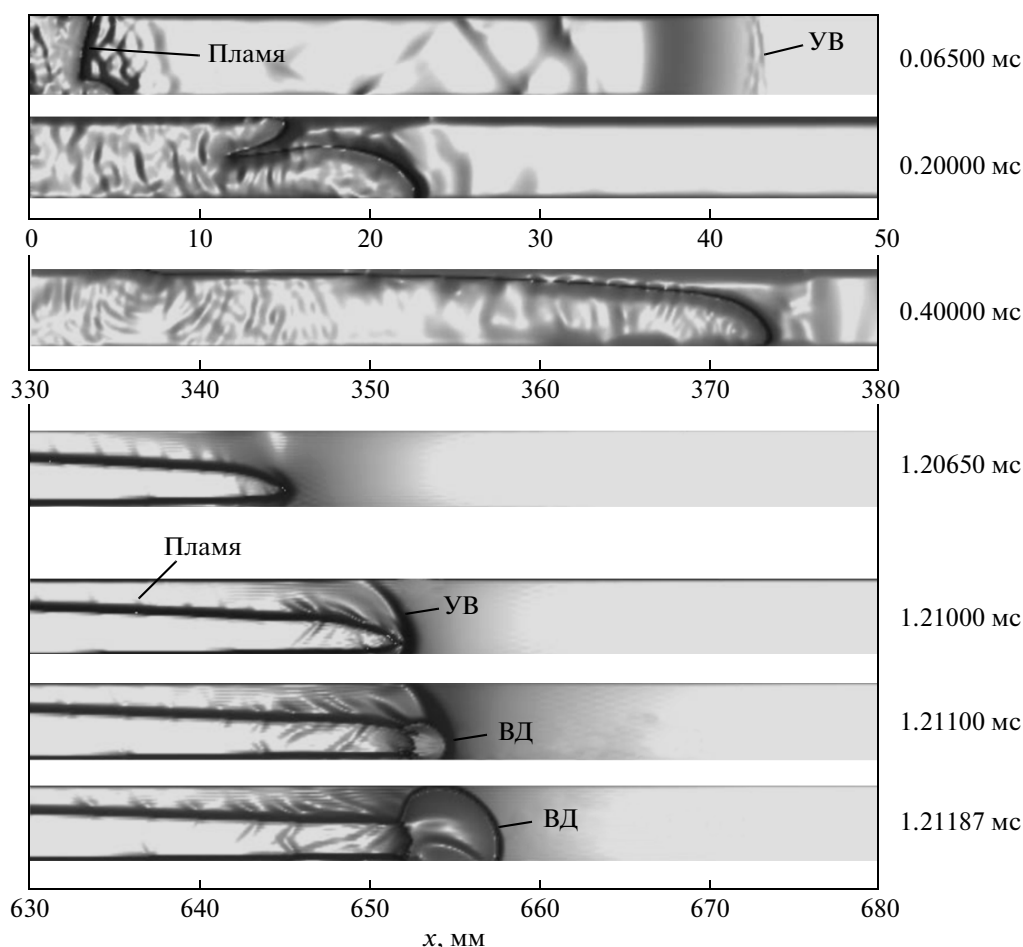
$$k_{f,b}(T) = A_{f,b} \exp\left(-\frac{E_{a_{f,b}}}{RT}\right). \quad (15)$$

Значения  $A_{f,b}$  и энергии активации  $E_{a_{f,b}}$  в (15), использованные в расчетах констант скоростей прямых и обратных реакций, приведены в табл. 3.

Вычисленные для водород-кислородных смесей характеристики пламени и волны детонации с использованием кинетической схемы R1–R9 хорошо согласуются с экспериментальными измерениями [22]. Например, при начальном давлении  $P_0 = 0.6$  бар ширина фронта и нормальная скорость ламинарного пламени составляют соответственно  $L_f = 0.44$  мм и  $U_f = 8.4$  м/с, адиабатическая температура  $T_b = 3012$  К, степень расширения  $\theta = \rho_u/\rho_b = 8.36$  ( $\rho_u$  и  $\rho_b$  — плотности перед фронтом пламени и за ним), скорость и температура детонации Чепмена–Жуге,  $DCJ = 2815$  м/с и  $TCJ = 3590$  К, что полностью согласуется с измеренными значениями [22].

Для численного решения системы уравнений газовой динамики использовался метод Эйлера–Лагранжа, известный как метод крупных частиц [32]. В этом методе все величины задаются в центрах ячеек эйлеровой сетки. Шаг по времени выполняется в три этапа. На первом, эйлеровом, этапе перенос между соседними ячейками считается замороженным. Решение системы уравнений газовой динамики прово-





**Рис. 6.** Результаты численного моделирования, показывающие эволюцию формы пламени, распространяющегося в смеси при  $P_0 = 1$  бар от закрытого конца канала шириной 5 мм, образование волн сжатия, ударных волн и переход в детонацию (изображен градиент плотности). Показаны расчетные домены, в которых находятся волна горения и ударные волны. Время указано справа от каждого кадра

дится без учета конвективных членов с использованием метода центральных разностей второго порядка точности по пространству. На втором, лагранжевом, этапе рассчитывается перенос массы, импульса и энергии через границы ячеек. На третьем этапе объединяются вклады в решение, полученные на первом и втором этапах. В [32] было показано, что вычислительная схема устойчива, когда перенос через границу ячеек происходит со скоростью, равной полусумме скоростей в соседних ячейках. Однако в этом случае второй этап, а следовательно, и весь алгоритм, имеет лишь первый порядок точности по пространству. Предложенный в [32] способ построения лагранжева этапа со вторым порядком точности по пространству в большинстве случаев делает схему неустойчивой. В отличие от [32], нами был ис-

пользован другой способ повышения точности второго этапа. Считалось, что скорость между центрами соседних ячеек изменяется по линейному закону. При этом в качестве скорости переноса вещества между соседними ячейками принимается скорость в точке, из которой масса за выбранный шаг по времени достигает границы ячейки. Модифицированный таким образом метод крупных частиц использовался для решения различных задач горения и показал хорошее согласие с экспериментами при численном моделировании таких эффектов, как возникновение стука в двигателях внутреннего сгорания [33, 34] и самовоспламенение струи водорода при аварийной разгерметизации баллонов высокого давления [35]. Система уравнений химической кинетики решалась методом Гира [36].

#### 4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УСКОРЕНИЯ ПЛАМЕНИ И ПЕРЕХОДА ГОРЕНИЯ В ДЕТОНАЦИЮ В ВОДОРОД-КИСЛОРОДНОЙ СМЕСИ

Численно моделировалось распространение волны горения в двумерном канале шириной от 5 до 10 мм, заполненном стехиометрической водород-кислородной смесью при начальной температуре 300 К и начальном давлении от 0.6 до 1.0 атм. Минимальное количество счетных ячеек, приходящихся на ширину фронта пламени, составляло от 6 до 10. В начальный момент пламя инициировалось в виде плоского слоя вблизи закрытого конца канала. В течение малого времени после зажигания образуется плоский фронт пламени распространяющийся от закрытого к открытому концу канала. Эволюция фронта пламени в канале шириной 5 мм при начальном давлении 1.0 атм, демонстрирующая общую картину течения в канале, развитие неустойчивостей на фронте пламени, испускаемые ускоряющимся пламенем волны сжатия и ударные волны впереди, показана на рис. 6, где приведены распределения градиента плотности.

На первой стадии ускорения пламени ударные волны образуются далеко впереди перед пламенем, на расстоянии порядка 5 ширин канала. После примерно 0.4 мс начинается вторая стадия, когда темп ускорения волны горения (см. обсуждение понятия скорости волны горения выше) замедляется и слабые ударные волны начинают образовываться непосредственно на фронте пламени. В конце второй стадии ускорения пламени (при  $t = 1.21$  мс) сливающиеся впереди фронта пламени ударные волны образуют, примыкающий к пламени слой сжатого непрореагировавшего газа. После этого момента переход горения в детонацию происходит в течение времени меньшем, чем 1 мкс. Моменты времени для каждого кадра указанные справа на рис. 6 выбраны неравномерно. Показаны только демонстрирующие наиболее существенные особенности процесса расчетные домены, в которых находятся волна горения, ударные волны и волны сжатия. В согласии с экспериментальными результатами (см. рис. 1, 2) время перехода и преддетонационная длина уменьшаются с увеличением начального давления газовой смеси.

Рассчитанные зависимости скорости пламени от времени и переход в детонацию в канале шириной 5 мм для начальных давлений смеси  $P_0 = 0.6, 0.8, 1.0$  бар показаны на рис. 7. В течение первой стадии ускорения пламени, при  $t < 0.4-0.5$  мс, фронт пламени вытягивается вдоль стенок канала и деформи-

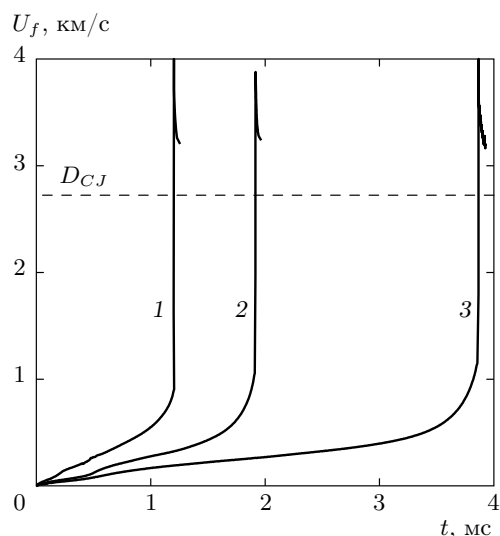


Рис. 7. Временные зависимости скорости волны горения, распространяющейся в канале шириной 5 мм, для начальных давлений  $P_0 = 1.0$  бар (1), 0.8 бар (2), 0.6 бар (3)

руется в результате развития возмущений. Изменение темпа роста скорости пламени при  $t = 0.4-0.5$  мс видно по изменению наклона кривых  $U_f(t)$  на рис. 7, качественно такому же, как для кривых  $v(t)$  на рис. 1.

Интенсивность ударной волны, образующейся непосредственно перед фронтом пламени, возрастает до  $M_{sh} = 2.3-2.4$ , и перед началом перехода в детонацию при  $t = 1.21$  мс к фронту пламени примыкает тонкий (3–4 мм) сжатый слой несгоревшего газа с максимальной температурой смеси от 500 до 550 К. Поскольку скорости реакций, определяющих инициирование горения, при таких температурах практически равны нулю, неоднородность распределения температуры перед фронтом пламени не играет роли. Наблюдаемое в численном эксперименте (см. рис. 6, 7) течение до перехода в детонацию соответствует картине образования ударной волны и слоя сжатого газа перед фронтом пламени на тепловых фотографиях (см. рис. 5).

Вычисленные распределения температуры, плотности и давления перед фронтом пламени непосредственно перед началом перехода в детонацию для начального давления смеси  $P_0 = 1.0$  бар при  $t = 1.21$  мс и для начального давления  $P_0 = 0.6$  бар при  $t = 3.85$  мс показаны на рис. 8. Фронт пламени можно рассматривать как полупроницаемый поршень, температура которого возрастает почти на порядок на масштабе ширины  $L_f$  фронта пламе-

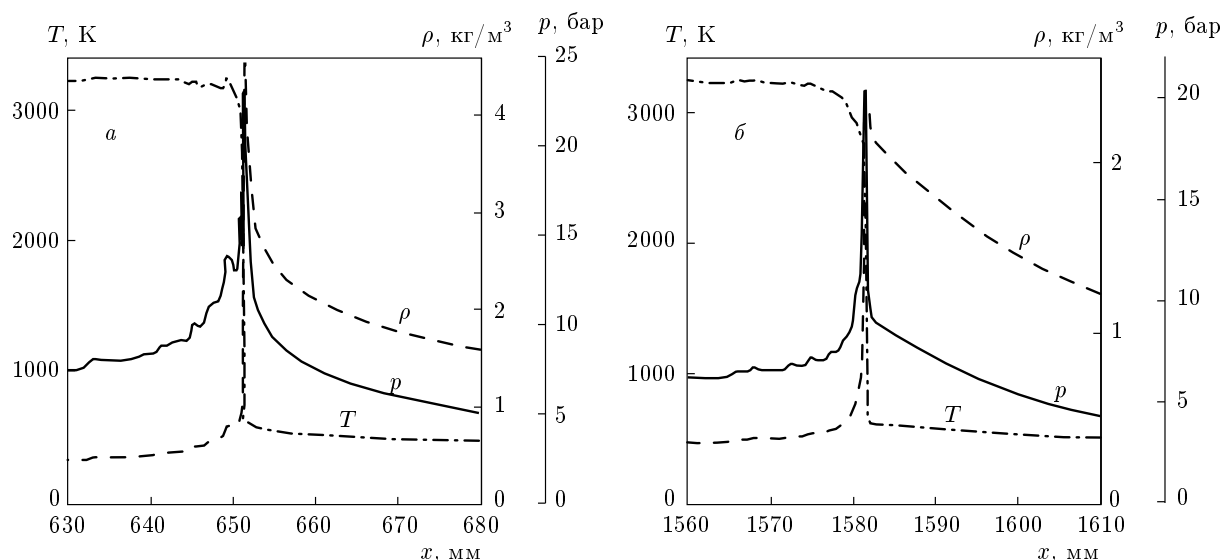


Рис. 8. Профили температуры (штрихпунктирные линии), плотности (штриховые) и давления (сплошные) перед началом перехода в детонацию для  $P_0 = 1$  бар при  $t = 1.21$  мс (а) и  $P_0 = 0.6$  бар при  $t = 3.85$  мс (б)

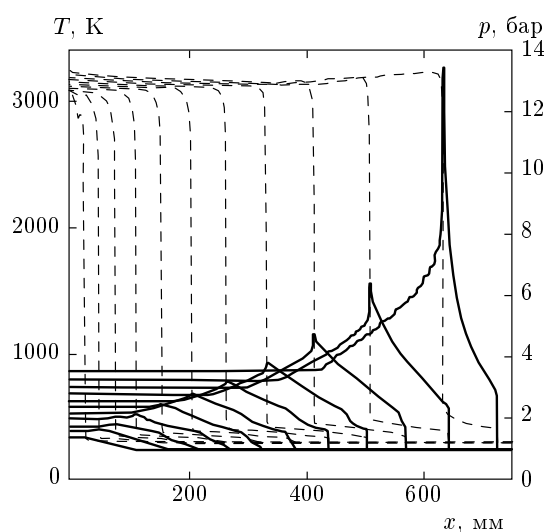


Рис. 9. Профили распределения давления (сплошная линия) и температуры (штриховые) для условий рис. 6 ( $P_0 = 1$  бар) в последовательные моменты времени от 0.2 до 1.2 мс с интервалом 0.1 мс

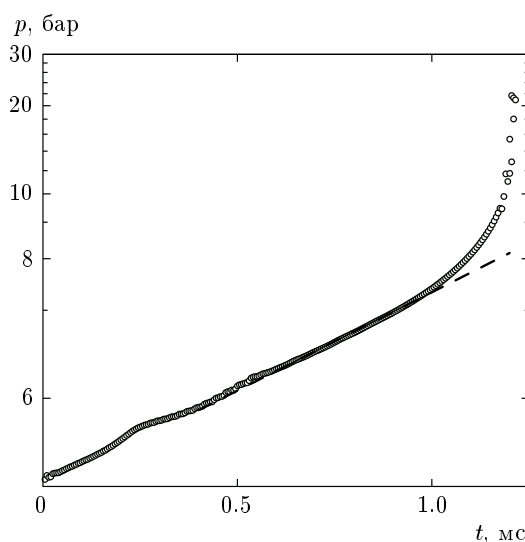


Рис. 10. Изменение во времени максимального значения давления в волне сжатия на фронте пламени: точки — численное моделирование; сплошная кривая — аппроксимация  $P_{max} = P_0 \exp(1.5464t/\text{мс})$

ни. Несгоревшая смесь, сжатая ударными волнами в слое перед фронтом пламени, проникает внутрь фронта, нагревается почти до конечной температуры за фронтом, инициируя цепные реакции горения. В результате на передней части фронта образуется узкий пик давления большой амплитуды. Уже в момент начала ПГД максимальное давление на переднем крае фронта пламени составляет 25 бар для  $P_0 = 1.0$  бар и около 20 бар для  $P_0 = 0.6$  бар. Стоит

отметить, что такое давление соответствует скачку давления за ударной волной почти такой же интенсивности, как интенсивность ведущей ударной волны в детонации.

На рис. 9 показаны профили распределения давления на фронте пламени от  $t = 0.2$  мс до  $t = 1.2$  мс с интервалом 0.1 мс для тех же параметров, что

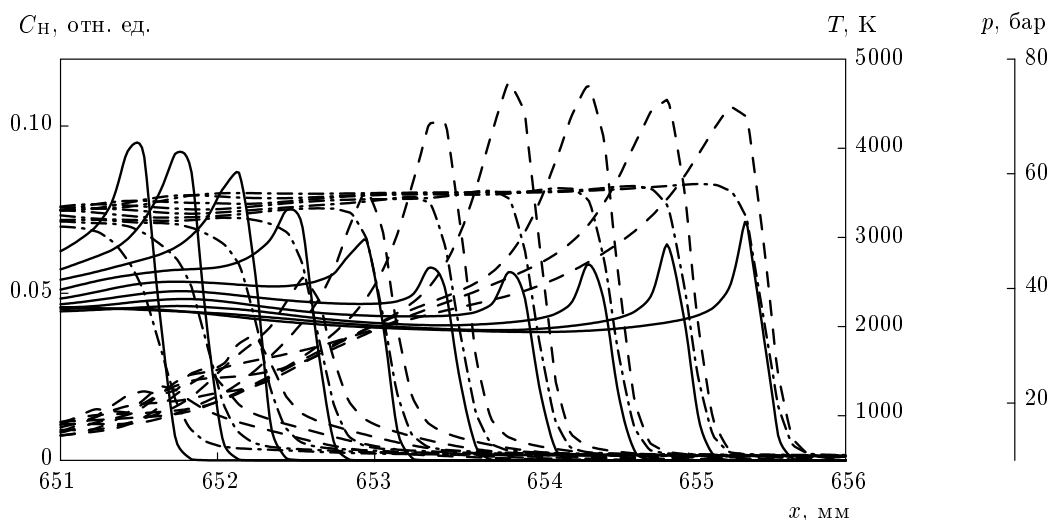


Рис. 11. Последовательности профилей температуры (штрихпунктирные кривые), давления (штриховые) и распределение относительной концентрации радикалов Н (сплошные) при ПГД при  $t = 1.2101875 \text{ мс} < t < 1.2113125 \text{ мс}$  с интервалом  $0.125 \text{ мкс}$

на рис. 6. В течение второй стадии ускорения ( $t \geq 0.4 \text{ мс}$ ) волны сжатия образуют ударные волны на фронте пламени. Начиная с этого момента, во фронт пламени поступает свежая смесь большей плотности, которая нагревается и вступает в реакцию. В результате на фронте пламени образуется пик волны давления. С увеличением плотности и давления возрастает нормальная скорость пламени и увеличивается амплитуда волн сжатия, производимых ускоряющимся фронтом. Пик волны давления с максимумом на переднем крае фронта пламени ускоряет реакции инициирования цепи, увеличиваясь по амплитуде за счет возрастания энергии, выделяющейся в ускоряющейся реакции, и «тащит» за собой волну горения. В результате положительной обратной связи пик давления на фронте пламени растет экспоненциально со временем. Максимальное давление достигается к моменту зарождения детонации, когда узкий пик давления большой амплитуды образует сильную ударную волну сразу перед фронтом пламени. Действительно, как видно из результатов расчетов, приведенных на рис. 10, максимум давления на фронте пламени при  $0.5 \text{ мс} < t < 1 \text{ мс}$  с большой точностью аппроксимируется экспонентой,

$$P_{max} = P_0 \exp(1.5464t/\text{мс}),$$

— сплошная линия на рис. 10, на котором кружками показаны значения давления, полученные в вычислениях. Хотя показатель экспоненты в приведенном выше выражении для роста максимума давления не удается найти аналитически, сам по себе экс-

поненциальный рост давления имеет простую физическую природу.

Изменения темпа роста давления видны по излому на кривой зависимости скорости от времени на рис. 10 при  $0.4 \text{ мс}$ . После  $1 \text{ мс}$  волна сжатия образует сильную ударную волну, которая формируется при  $1.21 \text{ мс}$ . Учитывая, что полуширина импульса волны давления в течение второй стадии ускорения пламени примерно равна ширине  $L_f$  фронта пламени, время образования ударной волны и перехода в детонацию можно оценить как время пересечения характеристик, выходящих из точки, соответствующей максимуму давления, и из точки перед пиком давления. Для времени ПГД получаем

$$t_{DDT} \approx L_f / (U_f + a_s) \leq 1 \text{ мкс},$$

где  $a_s$  — скорость звука, что согласуется с результатами расчетов, приведенных на рис. 6, где переход наблюдается между  $1.21$  и  $1.211 \text{ мс}$ . Поскольку ударная волна возникает на переднем крае фронта пламени, она с самого начала образует связанный с зоной реакции комплекс, соответствующий структуре волны детонации Зельдовича–фон Неймана–Дюринга.

На рис. 11 показаны профили температуры, давления и концентрации радикала Н в процессе перехода от горения к детонации для моментов времени от  $1.2101875 \text{ мс}$  до  $1.2113125 \text{ мс}$  с интервалом  $0.125 \text{ мкс}$ . Образование волны детонации видно по изменению градиента температуры, увеличению температуры продуктов горения и относительному измене-

нию профилей температуры и распределению радикала Н, «запускающего» реакции в горении  $\text{H}_2\text{-O}_2$ . В режиме медленного горения реакции распределены по фронту пламени, начинаясь примерно при 1100 К. Напротив, в детонации все реакции начинаются за температурным фронтом, за ударной волной.

Таким образом, механизмом перехода горения в детонацию является образование зоны сжатого непрореагировавшего газа перед фронтом пламени, образованного в течение второй стадии, когда ускоряющееся пламя производит слабые ударные волны непосредственно на фронте пламени. В результате возникает пик давления большой амплитуды, который растет экспоненциально во времени и превращается в сильную ударную волну, связанную с зоной реакции. Как видно из расчетов (см. рис. 11), температурный градиент не возникает и, следовательно, не является механизмом перехода горения в детонацию, по крайней мере, в случае быстро реагирующих газовых смесей в исследованных условиях. Можно было бы предположить, что градиентный механизм мог бы проявиться при более низких начальных давлениях смеси. Расчеты, проведенные для начального давления смеси  $P_0 = 0.6$  бар, показали, что и в этом случае механизм перехода в детонацию такой же, как и при  $P_0 = 1.0$  бар.

Следует отметить, что инициирование детонации при распространении узкого импульса давления большой амплитуды наблюдалось в работе [37], где рассматривалась одномерная численная газодинамическая модель с одноступенчатой химической реакцией с большой энергией активации. Авторы работы [37] рассматривали полученные решения как удивительный эффект, отмечая, что смысл полученных решений не ясен, поскольку не понятно, как могла бы образоваться такая узкая и сильная волна давления, и нет экспериментальных данных, которые объясняли бы образование такого узкого пика давления.

## 5. УСКОРЕНИЕ ПЛАМЕНИ И МЕХАНИЗМ ПЕРЕХОДА В ДЕТОНАЦИЮ

Эксперименты и численное моделирование ПГД показывают, что переход горения в детонацию начинается после того, как ударные волны образуются непосредственно на фронте пламени, создавая слой сжатого и нагретого газа, примыкающий к фронту. Таким образом, особенность ускорения волны горения в трубах без проскальзывания газа на стенках является основным фактором, определяющим физический механизм ПГД в быстро реагирующих сме-

сях, впервые отмеченный авторами ранее [38–40], где учитывался только нагрев газа в слое.

В приближении тонкого фронта скорость волны горения растет пропорционально поверхности (в двумерной задаче — длине) фронта пламени [2]. Поверхность фронта пламени увеличивается за счет неустойчивостей, изгибающих фронт пламени и увеличивающих скорость волны горения, например, гидродинамической неустойчивости [1, 2]. Однако основной вклад в увеличение поверхности фронта и ускорение пламени на начальной стадии вносит растяжение фронта вдоль стенок трубы в результате трения газа о стенки и неравномерного распределения скорости по сечению трубы в потоке перед пламенем. Ускорение пламени из-за неравномерного распределения скорости потока по сечению трубы обсуждалось уже в ранних работах [3, 4]. В работе [41] было показано, что для параболического распределения скорости в потоке перед пламенем скорость волны горения экспоненциально растет со временем. В предположении параболического распределения скорости в потоке перед пламенем экспоненциальный неограниченный рост скорости из-за растяжения и ускорения пламени использовался в работе [42] для объяснения взрыва и перехода в детонацию. Однако в случае быстро реагирующих смесей, таких как водород–кислород, ацетилен–воздух и др., пуазейлевское течение в потоке перед пламенем устанавливается за время, на несколько порядков большее, чем все время распространения пламени до ПГД. Параболическое распределение скорости в потоке перед пламенем может возникнуть после некоторого периода в случае медленно реагирующих смесей, однако в этом случае скорее турбулентность потока будет определяющим фактором для ПГД.

Рассмотрим простую модель пламени, распространяющегося от закрытого конца трубы, которая тем не менее позволяет понять особенности ускорения пламени в трубах, существенные для физики ПГД. Пламя распространяется от закрытого конца со скоростью  $U_{fl} = \theta U_f$  относительно стенок трубы, а несгоревшая смесь перед фронтом движется со скоростью  $u = (\theta - 1)U_f$ . Здесь  $U_f$  — нормальная скорость пламени относительно неподвижного газа,  $\theta = \rho_u/\rho_b \approx 10$  — отношение плотностей  $\rho_u$  перед фронтом пламени и  $\rho_b$  за ним. Течение перед пламенем образуется за ударной волной, возникающей от волн сжатия, испускаемых ускоряющимся фронтом пламени. При этом между пламенем и ударной волной образуется течение с тонким пограничным слоем и распределением скоростей, почти постоянным по поперечному сечению трубы. В результате

скорость пламени равна  $U_{fl} = \theta U_f$  почти во всем поперечном сечении трубы и уменьшается в узком пограничном слое до  $U_f$  на стенке, так что края фронта вытягиваются назад вдоль стенок трубы в пограничном слое. Поскольку увеличение скорости пламени пропорционально увеличению поверхности фронта, которая в приближении малой (по сравнению с толщиной трубы) толщины пограничного слоя растёт линейно со скоростью, скорость пламени растёт экспоненциально со временем. Скорость пламени относительно стенок трубы в приближении тонкого фронта можно представить в виде

$$U_{fl} = \theta U_f \exp(\alpha U_f t / D), \quad (16)$$

где  $\alpha$  — численный множитель порядка единицы,  $D$  — ширина канала (трубы).

Рассматривая ускоряющийся фронт пламени как поршень, генерирующий волны сжатия, можно найти расстояние перед фронтом пламени, на котором волна сжатия формирует ударную волну. На этом расстоянии в римановом решении для простой волны сжатия скорость становится многозначной функцией [1]. В результате вычислений легко найти, что для поршня, движущегося со скоростью (16), ударная волна образуется при конечной скорости в промежуточной точке волны сжатия:

$$u = \frac{2a_{s0}}{\gamma + 1} \left[ 1 - \gamma(\theta - 1) \frac{U_{eff}}{a_{s0}} \right], \quad (17)$$

где

$$U_{eff}(t) = U_f \{1 + \theta [\exp(\alpha U_f t / D) - 1]\}$$

— скорость фронта пламени (поршня) в системе координат, движущейся с потоком перед фронтом. Расстояние от фронта пламени до места образования ударной волны с точностью до  $U_{eff}/a_{s0} \ll 1$  равно нескольким ширинам трубы  $D$ :

$$X_{sh} = \frac{D}{\alpha(\gamma + 1)} \frac{a_{s0}}{U_{eff}} \times \left\{ \gamma^2 + \gamma + 2 - 2 \left[ \frac{(\gamma + 1)^2}{4} - 1 \right] \ln \frac{2a_{s0}}{\theta(\gamma + 1)U_{eff}} \right\}. \quad (18)$$

Отметим, что экспоненциальный рост скорости связан не с параболическим профилем скорости в потоке перед пламенем, а с растяжением фронта пламени в узком пограничном слое. Толщину ламинарного пограничного слоя, образующегося в течении за ударной волной, можно оценить как  $\delta_1 \propto (X_{sh} - X_f)/\sqrt{Re}$ , где  $X_{sh}$  и  $X_f$  — координаты ударной волны и фронта пламени. Поскольку расстояние от пламени до ударной волны порядка

нескольких диаметров трубы, для больших чисел Рейнольдса  $Re$  толщина пограничного слоя много меньше диаметра трубы. Время образования пуазейлевского распределения скорости в потоке перед пламенем можно оценить как время, когда толщина пограничного слоя становится порядка диаметра трубы. Пользуясь известным соотношением [2] между шириной фронта и скоростью ламинарного пламени,  $L_f U_f \approx \nu$ , где  $\nu$  — кинематическая вязкость, число Рейнольдса в течении перед пламенем можно представить в виде

$$Re = \frac{Du}{\nu} = \frac{(\theta - 1)D}{L_f}.$$

Соотношение  $L_f U_f \approx \nu$  справедливо с точностью до порядка величины. Принимая для оценки экспериментальные значения

$$L_f \approx 0.02 \text{ см}, \quad D = 5 \text{ см}, \quad D/L_f \approx 10^2,$$

$$\theta \approx 10, \quad X_{sh} - X_f \approx 5D,$$

получим  $Re = 10^3 - 10^4$ .

Отсюда следует, что максимальная толщина пограничного слоя возле фронта пламени составляет около 5 мм в условиях экспериментов в разд. 2, а для условий численного моделирования — около 0.5 мм. Время образования пуазейлевского течения перед пламенем можно оценить, считая, что течение начинается в трубе за ударной волной, тогда это время равно

$$t_P \approx \theta \left( \frac{D}{L_f} \right)^2 \frac{L_f}{U_f} \sim 10^5 \frac{L_f}{U_f} \sim 10^4 \text{ мс},$$

что намного больше времени распространения пламени до ПГД, которое порядка миллисекунды. Пуазейлевское течение перед пламенем может образовываться с самого начала в случае пламени в капилляре очень малого диаметра. Критический диаметр, при котором возникает пуазейлевское течение, например, для горения в этилен-кислородной смеси равен примерно 0.45 мм. Изменение характера течения должно быть видно по исчезновению излома на кривой зависимости скорости от времени в экспериментах [43] для диаметра трубки меньше 0.45 мм.

Первая стадия экспоненциального ускорения пламени длится короткий промежуток времени. Принимая во внимание, что характерный масштаб теплопроводности порядка толщины фронта пламени, получим, что при  $t \geq \tau_f \sqrt{D/\theta L_f} \approx 5\tau_f$  угол в вершине складки, образованной в пограничном слое между фронтом пламени и стенкой, уменьшается так, что поток тепла из зоны реакции в поперечном направлении становится порядка потока тепла

вдоль оси трубы. При этом поверхность фронта пламени начнет быстро уменьшаться либо за счет нагрева смеси внутри складки и увеличения скорости части пламени вблизи вершины угла в складке, либо из-за гашения части пламени возле вершины складки в случае большой теплопроводности стенки трубы. Уменьшение поверхности фронта пламени приводит к уменьшению степени нарастания скорости волны горения. Поскольку с точностью до малых членов порядка  $L_f/D \ll 1$  из (16) следует, что ускорение в течении первой стадии постоянно, на второй стадии, при  $t \geq \tau_f \sqrt{D/\theta L_f} \approx 5\tau_f$ , скорость волны горения можно представить как

$$U_f \approx U_{eff} [1 + \beta(t/\tau_f)^n], \quad 0 < n < 1. \quad (19)$$

В случае поршня, движущегося со скоростью (19), скорость простой волны сжатия в решении Римана всегда является многозначной функцией при любых значениях показателя степени  $n < 1$ . Конкретное значение  $n < 1$  при этом несущественно, поскольку нас интересует только место образования ударных волн относительно фронта пламени. Поскольку решение для скорости всегда многозначная функция, волна сжатия превращается в течение второй стадии ускорения в ударную волну прямо на поверхности поршня, т. е. непосредственно вблизи фронта пламени.

Рассмотренный в данной работе сценарий образования ударных волн ускоряющимся в трубе пламенем не учитывает более сложной картины, включающей неустойчивости фронта, взаимодействие фронта пламени с волнами сжатия, отраженными от стенок трубы, и т. п. Вместе с тем такая модель показывает общий характер процессов, приводящих к образованию слоя сжатого и нагретого газа, прилегающего к фронту пламени, который является определяющим процессом, включающим ПГД. Тот факт, что ударные волны образуются непосредственно на фронте пламени в результате изменения темпа ускорения пламени в трубе, впервые рассматривался авторами ранее [38, 39]. При этом предполагалось, что уже только нагрев свежей смеси газа непосредственно перед фронтом пламени может приводить к ускорению и уширению фронта пламени, в результате которого при перестройке температурного профиля пламени образуется температурный градиент для перехода в детонацию по механизму Зельдовича.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Эксперименты и численное моделирование с учетом химической кинетики горения смеси  $H_2-O_2$  по-

казывают, что ПГД в быстро реагирующих смесях инициируется образованием примыкающего спереди к фронту пламени слоя газа, сжатого ударной волной. Анализ механизма перехода в детонацию в настоящей работе показывает, что сжатие газа ударными волнами перед пламенем и возникающий в результате пик давления большой амплитуды на фронте пламени оказываются наиболее существенными процессами для механизма ПГД. Экспоненциально растущее со временем давление в волне сжатия на передней части фронта пламени ускоряет инициирование горения, уменьшая время зажигания, одновременно усиливая волну сжатия, так что волна сжатия образует сильную ударную волну, связанную с зоной реакции.

Детальное численное моделирование показывает, что градиент температуры не возникает в процессе образования детонации и что градиентный механизм не является механизмом ПГД по крайней мере для рассмотренных здесь быстро реагирующих смесей. Следует отметить, что осуществимость градиентного механизма Зельдовича инициирования детонации была показана только в рамках одномерных численных моделей. С другой стороны, слой прогретого газа, примыкающий к участку фронта пламени, может образоваться без участия ударной волны. Такая конфигурация может возникнуть при инициировании горения в узкой щели [44] или при нагреве газа, захваченного внутри щели на фронте пламени, образованной в результате неустойчивости фронта [45]. Узкая щель на фронте может образоваться также при взаимодействии пламени с турбулентными вихрями в случае медленного пламени или при распространении в трубе с препятствиями.

Авторы благодарят Российский национальный фонд подготовки кадров в сфере высшего образования и Федеральное агентство по науке и инновациям за поддержку настоящей работы. Работа выполнена в рамках Государственного контракта (№ 02.740.11.5108) по Программе «Исследование фундаментальных процессов ламинарного и турбулентного горения и возможности контролирования процессов горения с помощью возбужденных молекул и радикалов кислорода, генерируемых в неравновесной плазме». Мы благодарим С. М. Фролова, Б. Э. Мейеровича, Н. Н. Смирнова и М. Радулеску (M. Radulescu) за полезные обсуждения. Один из авторов (М. А. Л.) выражает глубокую благодарность И. Я. Кошацкому (I. Ya. Koshatskii).



## ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Гидродинамика*, Наука, Москва (1986).
2. Я. Б. Зельдович, Г. И. Баренблат, В. Б. Либрович, Г. М. Махвиладзе, *Математическая теория горения и взрыва*, Наука, Москва (1980).
3. Я. Б. Зельдович, А. С. Компанец, *Теория детонации*, Изд-во технико-теоретической литературы, Москва (1955).
4. К. И. Щелкин, УФН **87**, 273 (1965).
5. А. С. Соколик, *Самовоспламенение, пламя и детонация в газах*, Изд-во АН СССР, Москва (1960).
6. *Lees' Loss Prevention in the Process Industries: Hazard Identification, Assessment and Control*, ed. by S. Mannan and F. P. Lees. Butterworth-Heinemann Publ. (2005).
7. *Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Nuclear Safety, State-of-the Art Report*, OCDE-Nuclear Safety, NEA/CSNI/R (2000).
8. J. H. S. Lee, *Explosion Problems for Hydrogen Safety*, in *Proc. of the 1<sup>st</sup> Eur. Summer School on Hydrogen Safety*, Belfast, Ireland (2006).
9. *Импульсные детонационные двигатели*, под ред. С. М. Фролова, Изд-во Торус Пресс, Москва (2006).
10. J. C. Niemeyer and S. E. Woosley, *Astrophys. J.* **475**, 740 (1997).
11. M. Reinecke, W. Hillebrandt, and J. C. Niemeyer, *Astron. Astrophys.* **391**, 1167 (2002).
12. К. И. Щелкин, ЖЭТФ **10**, 823 (1940).
13. К. И. Щелкин, Я. К. Трошин, *Газодинамика горения*, Наука, Москва (1965).
14. Я. Б. Зельдович, В. Б. Либрович, Г. М. Махвиладзе, Г. И. Сивашинский, ПМТФ № 2, 76 (1970); Ya. B. Zel'dovich, V. B. Librovich, G. M. Makhviladze, and G. I. Sivashinsky, *Astronautica Acta* **15**, 313 (1970).
15. Ya. B. Zel'dovich, *Combust. Flame* **39**, 211 (1980).
16. Б. Е. Гельфанд, А. Н. Поленов, С. М. Фролов, С. А. Цыганов, *Физика горения и взрыва* № 4, 118 (1985).
17. Б. Е. Гельфанд, С. М. Фролов, А. Н. Поленов, С. А. Цыганов, *Хим. физика* № 9, 1277 (1986).
18. Ya. B. Zel'dovich, B. E. Gelfand, S. A. Tsyganov et al., *Progr. Astron. Aero.* **114**, 99 (1988).
19. A. M. Khokhlov, E. S. Oran, and J. G. Wheeler, *Combust. Flame* **105**, 503 (1997).
20. A. K. Kapila, D. W. Schwendeman, J. J. Quirk, and T. Hawa, *Combust. Theory Modelling* **6**, 553 (2003).
21. E. S. Oran and V. N. Gamezo, *Combust. Flame* **148**, 4 (2007).
22. M. Kuznetsov, M. A. Liberman, and I. Matsukov, in *Proc. of the 22<sup>nd</sup> ICDERS. Experimental Study of the Preheat Zone Formation and Deflagration-to-Detonation Transition*, Minsk (2009), paper № 178.
23. M. Kuznetsov, V. Alekseev, I. Matsukov, and S. Dorofeev, *Shock Waves* **14**, 205 (2005).
24. M. Kuznetsov, G. M. Ciccarelli, S. Dorofeev et al., *Shock Waves* **12**, 215 (2002).
25. P. Urtiew and A. K. Oppenheim, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **295**, 13 (1966).
26. J. W. Meyer, P. A. Urtiew, and A. K. Oppenheim, *Combust. Flame* **14**, 13 (1970).
27. J. W. Meyer and A. K. Oppenheim, *Combust. Flame* **17**, 65 (1971).
28. J. B. Heywood, *Internal Combustion Engine Fundamentals*, Mc. Graw-Hill, New York (1988).
29. J. Warnatz, U. Maas, and R. W. Dibble, *Combustion. Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulations, Experiments, Pollutant Formation*, Springer, Berlin (2001).
30. J. O. Hirschfelder, C. F. Gurtiss, and R. B. Bird, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley, New York (1964).
31. Ю. А. Бохон, В. А. Гальбурт, Ю. А. Гостинцев и др., Препринт ИВТАН № 2-416, Москва (1998).
32. О. М. Белоцерковский, Ю. М. Давыдов, *Метод крупных частиц в газовой динамике*, Наука, Москва (1982).
33. M. A. Liberman, M. F. Ivanov, O. D. Peil, and D. M. Valiev, *Combust. Sci. Techn.* **177**, 151 (2005).
34. M. A. Liberman, M. F. Ivanov, and D. M. Valyev, *Combust. Sci. Techn.* **178**, 1613 (2006).
35. Т. В. Баженова, М. В. Брагин, В. В. Голуб, М. Ф. Иванов, ТВТ **45**, 733 (2007).
36. Э. Найрер, Г. Ваннер, *Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциальные алгебраические задачи*, Мир, Москва (1999).
37. J. M. Dold, M. Short, J. F. Clarke, and N. Nikiforakis, *Combust. Flame* **100**, 465 (1995).

38. M. A. Liberman, *Introduction to Physics and Chemistry of Combustion*, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg (2008).
39. M. Liberman, M. Kusnetsov, A. Ivanov, and I. Matsukov, *Phys. Lett. A* **373**, 501 (2009).
40. M. A. Liberman, M. Kuznetsov, I. Matsukov, and A. Ivanov, in *Proceedings of 22<sup>nd</sup> ICDEERS*, Minsk, Belarus (2009), paper № 3.
41. C. Clanet and G. Searby, *Combust. Flame* **105**, 225 (1996).
42. V. Bychkov, A. Petchenko, V. Akkerman, and L.-E. Eriksson, *Phys. Rev. E* **72**, 046307 (2005).
43. M. H. Wu, M. P. Burke, S. J. Son, and R. A. Yetter, *Proc. Combust. Inst.* **31**, 2429 (2007).
44. L. Kagan, M. Liberman, and G. Sivashinsky, *Proc. Combust. Inst.* **31**, 2415 (2007).
45. M. A. Liberman, G. I. Sivashinsky, D. M. Valiev, and L.-E. Eriksson, *Int. J. Transport Phen.* **8**, 253 (2006).