

УДК 533.6

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ ВРЕМЕНИ ЗАДЕРЖКИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ЗА ПАДАЮЩИМИ УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ

В. Ю. Гидаспов, Н. С. Северина

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)  
125993 Москва, severina@mai.ru

Приведены физико-математическая модель и результаты численного моделирования инициирования и распространения детонационных волн в ударных трубах. Рассматривается горючая смесь водорода с кислородом, разбавленная аргоном. Расчетным путем получена детальная структура течения в ударной трубе. Проведено сравнение результатов расчета времени задержки воспламенения с экспериментальными данными.

Ключевые слова: ударная труба, детонация, задержка воспламенения, численное моделирование, явное выделение газодинамических разрывов.

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

За последние 50 лет проведено множество экспериментальных и расчетно-теоретических исследований задержки воспламенения в горючих водородокислородных смесях (см., например, [1, 2] и библиографию в них). Тем не менее до сих пор ведутся работы по созданию механизмов горения, позволяющих описывать экспериментальные данные, полученные в различных условиях, а также численных методов их верификации. В настоящей работе для анализа результатов экспериментов в ударной трубе, выполненных в НИИ механики МГУ, используются вычислительные методики, развитые в [3]. Подробное описание установки и экспериментов приведено в [4]. Ударная труба состоит из камеры высокого давления (КВД) длиной 1 м и камеры низкого давления (КНД) длиной 4.5 м, разделенных диафрагмой. КНД наполняли горючей смесью водорода с кислородом, разбавленной аргоном, а КВД — толкающим газом (гелием). В результате разрыва диафрагмы в ударной трубе происходит образование ударной волны (УВ), распространяющейся по горючей смеси, контактного разрыва, отделяющего горючую смесь от инертного газа, и веера волн разрежения, распространяющихся по инертному газу. УВ нагревала горючую смесь, в окрестности контактного разрыва смесь воспламенялась, при этом образовывались волны сжатия, которые догоняли

УВ и усиливали ее. В итоге воспламенялась вся зона между УВ и контактным разрывом и появлялась пересжатая детонационная волна (ДВ), которая через некоторое время выходила на режим распространения со скоростью, близкой к постоянной. Целью экспериментальных исследований было определение времени задержки воспламенения горючей смеси в стационарной пересжатой ДВ. Измерения проводили в трех идентичных измерительных сечениях, центральные сечения которых расположены на расстояниях  $X = 2.4, 4$  и  $4.2$  м от диафрагмы. Определяли скорость УВ  $D_{exp}$  и задержку воспламенения горючей смеси  $\tau_{exp}$  — время появления максимума излучения ОН\* в сечении наблюдения после прохождения УВ (лабораторное время).

Для описания течения в ударной трубе использовались одномерные нестационарные уравнения физической газовой динамики

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x} \rho u = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho (e + 0.5u^2) + \frac{\partial}{\partial x} \rho u (h + 0.5u^2) = 0$$

и уравнение, описывающее изменение концентраций химических компонентов:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \gamma_i + \frac{\partial}{\partial x} \rho u \gamma_i = W_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (2)$$

где  $\rho$ ,  $u$ ,  $p$ ,  $e$ ,  $h$  — плотность, скорость, давление, удельные внутренняя энергия и энтальпия газа соответственно,  $\gamma_i$  — молярно-массовые концентрации,  $N$  — число рассматриваемых компонентов,  $W_i$  — скорость образования  $i$ -го компонента в единице объема в результате химических реакций. Эффекты вязкости, теплопроводности и диффузии не учитывались. Система (1), (2) замыкалась моделью термодинамики многокомпонентного совершенного газа, использующей удельный термодинамический потенциал Гиббса:

$$G(p, T, \bar{\gamma}) = \sum_{i=1}^N \gamma_i \left\{ RT \ln \left[ p \gamma_i / \left( p_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j \right) \right] + G_i^0(T) \right\}, \quad (3)$$

где  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $T$  — температура,  $p_0 = 101\,325$  Па — стандартное давление,  $G_i^0(T)$  — известная [5] температурная часть стандартных молярных потенциалов Гиббса отдельных компонентов. Соответствующие (3) термическое и калорическое уравнения состояния имеют вид

$$\frac{1}{\rho} = RT \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i}{p}, \quad h = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T), \quad (4)$$

$$H_i^0(T) = G_i^0(T) - T \frac{dG_i^0(T)}{dT}, \quad e = h - RT \sum_{i=1}^N \gamma_i.$$

В случае произвольного механизма из  $N_r$  химических реакций

$$\sum_{i=1}^N \vec{\nu}_i^{(r)} M_i \leftrightarrow \sum_{i=1}^N \overleftarrow{\nu}_i^{(r)} M_i, \quad r = 1, 2, \dots, N_r, \quad (5)$$

выражение для правой части уравнения (2) принимает вид

$$W_i = \sum_{r=1}^{N_r} (\overleftarrow{\nu}_i^{(r)} - \vec{\nu}_i^{(r)}) \left( \vec{K}^{(r)} \prod_{j=1}^N (\rho \gamma_j)^{\vec{\nu}_j^{(r)}} - \overleftarrow{K}^{(r)} \prod_{j=1}^N (\rho \gamma_j)^{\overleftarrow{\nu}_j^{(r)}} \right). \quad (6)$$

Здесь  $M_i$  — символ  $i$ -го вещества,  $\vec{\nu}_i^{(r)}$ ,  $\overleftarrow{\nu}_i^{(r)}$  — стехиометрические коэффициенты,

$\vec{K}^{(r)}$ ,  $\overleftarrow{K}^{(r)}$  — константы скоростей прямых и обратных реакций, связанные константой равновесия [5].

Для описания химических превращений в горючей смеси использовались 45 обратимых химических реакций, предложенных в [6]. В реакциях участвовали 10 компонентов:  $H_2$ ,  $OH$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$ ,  $H_2O_2$ ,  $HO_2$ ,  $H$ ,  $O$ ,  $O_3$ ,  $Ag$ , термодинамические свойства которых (аппроксимационные формулы для  $G_i^0(T)$ ) заимствованы из [5]. Численное моделирование проводилось оригинальным сеточно-характеристическим методом, позволяющим рассчитывать квазиодномерные нестационарные течения многокомпонентного реагирующего газа с явным выделением произвольного числа взаимодействующих разрывов (УВ, контактных разрывов, характеристик семейств  $C^\pm$ ) [7, 8].

Исследовалась применимость используемой вычислительной модели и кинетического механизма [6] для определения времени задержки воспламенения в пересжатой ДВ и параметров выхода ДВ на стационарный режим распространения.

## ЗАДАНИЕ НАЧАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Начальные данные для численного моделирования соответствовали условиям экспериментов [4]. В начальный момент времени газ в ударной трубе покоился, температура равнялась 298.15 К, химические превращения не происходили, в КНД находилась горючая смесь при пониженном давлении, в КВД — гелий при высоком давлении. Начальное давление в КВД  $p_{КВД}$  подбиралось таким образом, чтобы в результате численного моделирования образовывалась стационарная пересжатая ДВ, распространяющаяся по горючей смеси со скоростью, наблюдаемой в экспериментах. Было предложено находить  $p_{КВД}$  из решения автомодельной задачи о распаде произвольного разрыва в равновесно реагирующем газе [9]. Считалось, что давление, температура и концентрации продуктов сгорания между УВ и контактным разрывом удовлетворяют условиям химического равновесия. В случае, когда в начальный момент времени газ в ударной трубе покоится, давление на контактном разрыве находят как корень уравнения [10]

$$F(p) = \int_{p_{\text{КВД}}}^p \frac{dp}{\rho a} + \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_{\text{КНД}}} - \frac{1}{\rho_{\text{п}}}\right)(p - p_{\text{КНД}})} = 0. \quad (7)$$

Для вычисления плотности и скорости звука [9], входящих в подынтегральное выражение как функции давления, использовались уравнения состояния (4) и условие сохранения энтропии  $S_{\text{КВД}}$  в веер волн разрежения:

$$S = \frac{S_{\text{He}}^0(T) - R \ln(p/p_0)}{m_{\text{He}}} = S_{\text{КВД}}. \quad (8)$$

Здесь  $m_{\text{He}}$  — молекулярная масса гелия. При вычислении плотности  $\rho_{\text{п}}$ , температуры  $T_{\text{п}}$  и молярно-массовых концентраций  $\gamma_{\text{п},i}$  справа от контактного разрыва использовались уравнения состояния (4) и выражение для равновесной детонационной адиабаты

$$\sum_{i=1}^N \gamma_{\text{п},i} H_i^0(T_{\text{п}}) - H_{\text{КНД}} - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\rho_{\text{п}}} + \frac{1}{\rho_{\text{КНД}}} \right) (p - p_{\text{КНД}}) = 0. \quad (9)$$

При этом  $\gamma_{\text{п},i}$  удовлетворяют уравнениям сохранения элементного состава и условиям химического равновесия:

$$\sum_{i=1}^N A_k^i \gamma_{\text{п},i} = \sum_{i=1}^N A_k^i \gamma_{\text{КНД},i} = \gamma_k^0, \quad k = 1, \dots, N_e, \quad (10)$$

$$\mu_i = \sum_{k=1}^{N_e} A_k^i \tilde{\mu}_k, \quad i = 1, \dots, N, \quad (11)$$

где  $A_k^i$  — матрица состава, количество  $k$ -го элемента в  $i$ -м веществе,  $\gamma_k^0$  — заданное число молей  $k$ -го элемента в 1 кг исходной горючей смеси,  $\tilde{\mu}_k$  — неизвестные параметры,  $N_e$  — число химических элементов. Химический потенциал  $\mu_i$  задается выражением

$$\mu_i = \left( \frac{\partial G}{\partial \gamma_i} \right)_{p,T,\gamma_{j,j \neq i}} = RT \ln \left( \frac{p \gamma_{\text{п},i}}{p_0} / \sum_{j=1}^N \gamma_{\text{п},j} \right) + G_i^0(T_{\text{п}}). \quad (12)$$

Таким образом, плотность  $\rho_{\text{п}}$  и концентрации  $\gamma_{\text{п},i}$  в состоянии термодинамического равновесия можно считать неявно заданными функциями  $p$ ,  $T_{\text{п}}$  и  $\gamma_k^0$ ,  $k = 1, \dots, N_e$ . Система нелинейных алгебраических уравнений (7)–(12) решается с использованием алгоритма, приведенного в [9]. Из нее могут быть найдены давление  $p$  на контактном разрыве, температура и плотность слева и справа от разрыва ( $T_{\text{л}}$ ,  $T_{\text{п}}$ ,  $\rho_{\text{л}}$ ,  $\rho_{\text{п}}$ ), а также равновесные концентрации  $\gamma_{\text{п},i}$ ,  $i = 1, \dots, N$ . Данная задача имеет физически допустимые решения при скорости УВ (в рассматриваемой постановке — фактически ДВ), равной и превышающей скорость детонации Чепмена — Жуге для исследуемой горючей смеси. Скорости контактного разрыва и УВ находятся из соотношений

$$u = \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_{\text{КНД}}} - \frac{1}{\rho_{\text{п}}}\right)(p - p_{\text{КНД}})}, \quad (13)$$

$$D = \frac{\rho_{\text{п}} u}{\rho_{\text{п}} - \rho_{\text{КНД}}}. \quad (14)$$

Давление в КВД  $p_{\text{КВД}}$  подбиралось в итерациях таким образом, чтобы рассчитанная из (7)–(14) скорость УВ  $D$  равнялась наблюдаемой в экспериментах [4] скорости стационарной пережатой ДВ [11].

## РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В результате численного моделирования экспериментальных исследований [4] получены два режима формирования ДВ. На рис. 1–3 представлены картины течения, наблюдаемые в экспериментах № 32 и 143. Моменты времени, которым соответствуют кривые, приведенные на рис. 2, могут быть определены с помощью рис. 1. Временная развертка течения (рис. 1,а) включает УВ, распространяющуюся по горючей смеси, контактный разрыв и веер волн разрежения, распространяющийся в инертном газе. Горючая смесь воспламеняется на разрыве, образуются волна воспламенения и опережающая ее волна сжатия [12]. При  $t \approx 0.9$  мс характеристики, соответствующие волне сжатия, пересекаются, образуется висячая УВ, которая при  $t \approx 1$  мс взаимодействует с головной УВ, существенно ускоряя последнюю (рис. 3). Давление и температура

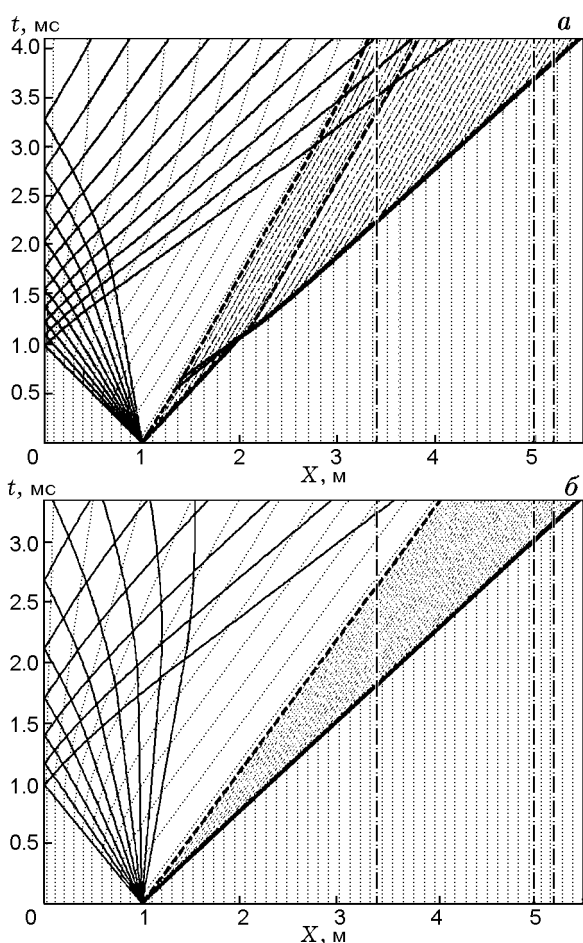


Рис. 1. Временная развертка течения в экспериментах № 32 (а) и № 143 (б)

(рис. 2, б) в зоне, непосредственно примыкающей к УВ, также резко возрастают, формируется нестационарная пересжатая ДВ, которая в дальнейшем (к моменту времени  $t \approx 2$  мс, рис. 2, б; 3) выходит на режим распространения со скоростью, близкой к постоянной. В эксперименте № 143 (рис. 1, б) волна сжатия догоняет головную УВ раньше, чем успевает образоваться висячий скачок. В результате головная УВ, монотонно ускоряясь (см. рис. 3), переходит в детонационную. Отсутствует наблюдаемый в эксперименте № 32 (см. рис. 1, а; 2, а) вторичный контактный разрыв (рис. 2, б). На рис. 3 приведены графики скорости УВ (кривые 1, 2) и скорости стационарной равновесной пересжатой ДВ [11] (кривые 3, 4), предварительно рассчитанной в результате решения задачи о распаде разрыва в равновесно реагирующем газе [9]. Отличие скоростей при  $X = 5$  м составляет  $\approx 0.3\%$  и уменьшается с ростом  $X$ . Необходи-

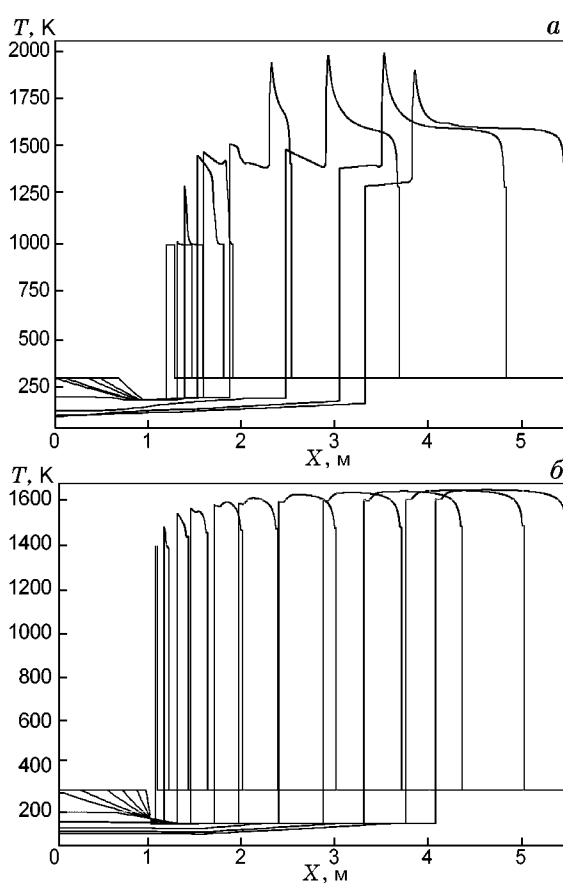


Рис. 2. Распределения температуры в экспериментах № 32 (а) и № 143 (б)

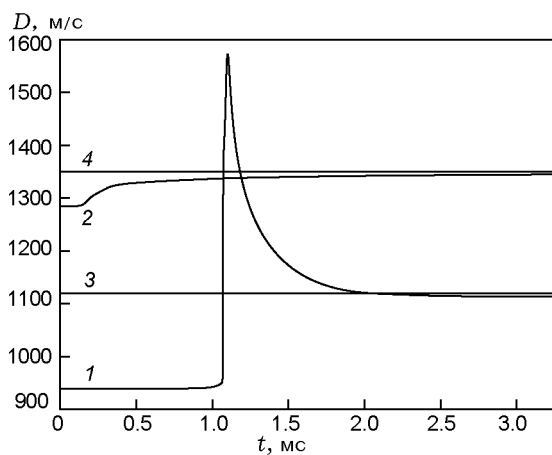


Рис. 3. Зависимость скорости головной УВ от времени:

1 — эксперимент № 32, 2 — № 143; 3, 4 — скорости пересжатой ДВ, полученные из решения авторемодельной равновесной задачи о распаде разрыва [11]

мо отметить, что эксперименты № 32 и 143 выбраны для иллюстрации развития процесса, в других экспериментах картина выхода на стационарный режим распространения ДВ может несколько отличаться от описанной.

При численном моделировании (см. рис. 1) использовалась расчетная сетка, включающая две точки на УВ (толстая сплошная линия), две точки на контактном разрыве (штриховая), траектории газа (пунктирные линии), фиксированные точки (штрихпунктирные), координаты которых соответствовали датчикам в ударной трубе, и характеристики (тонкие сплошные), число которых увеличивалось в процессе расчета. При моделировании эксперимента № 32 характеристики семейства  $C^+$  «зарождались» на контактном разрыве с шагом  $\Delta t = 10^{-3}$  мс (см. рис. 1). Число траекторий выбиралось таким образом, чтобы на зону воспламенения на стационарном участке распространения ДВ приходилось не менее 5 расчетных точек. В точке пересечения характеристик при  $t \approx 0.9$  мс и ударных волн при  $t \approx 1$  мс (см. рис. 1) решалась задача о распаде разрыва, образовавшиеся в результате ударные волны и контактные разрывы становились узлами разностной сетки и отслеживались в расчете.

Численное моделирование экспериментов [4] проведено в предположении, что по ударной трубе распространяется стационарная пересжатая ДВ со скоростью, наблюдаемой в экспериментах ( $D = \text{const}$ ) [13]. В этом случае рассматриваемая задача является автомодельной [3], все параметры течения за УВ зависят от переменной  $\xi = Dt - x$ , где  $x, t$  — координаты точки за УВ. Подставляя  $\xi$  ( $\frac{\partial \xi}{\partial t} = D, \frac{\partial \xi}{\partial x} = -1$ ) в уравнения (1)–(3), после алгебраических преобразований получаем систему дифференциально-алгебраических уравнений:

$$h - h_0 - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\rho} + \frac{1}{\rho_0} \right) (p - p_0) = 0, \quad (15)$$

$$p - p_0 - \rho_0^2 (D - u_0)^2 \left( \frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right) = 0, \quad (16)$$

$$\frac{d\gamma_i}{d\xi} = \frac{W_i}{\rho_0 (D - u_0)}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (17)$$

$$\gamma_i(0) = \gamma_{i0}.$$

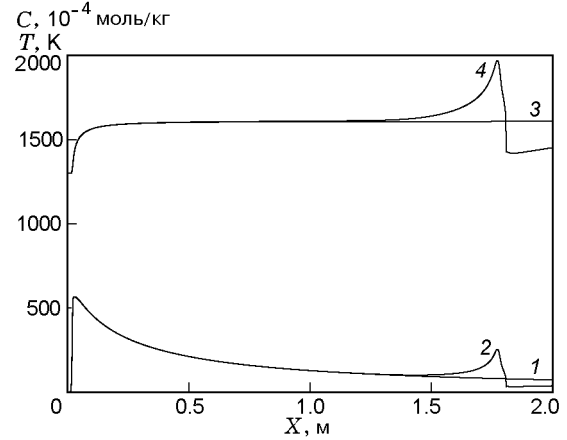


Рис. 4. Результаты сравнения расчетов стационарной пересжатой ДВ в нестационарной (2, 4) и стационарной (1, 3) постановках:

1, 2 — молярно-массовая концентрация ОН, 3, 4 — температура

Для замыкания (15)–(17) использовались уравнения состояния (4), индексом 0 помечены параметры перед УВ. Данная система имеет решение при скорости УВ  $D$ , равной и большей скорости детонации Чепмена — Жуге для горючей смеси. При больших значениях  $\xi$  решение (15)–(17) стремится к соответствующей точке на равновесной детонационной адиабате. Необходимо отметить, что в некоторых экспериментах (№ 13, 20, 21) [4] фиксировалась скорость стационарной ДВ, меньшая скорости Чепмена — Жуге. На рис. 4 приведены результаты сравнения расчетов, выполненных в нестационарной и стационарной постановках, начальные данные соответствуют эксперименту № 32. По оси абсцисс отложено расстояние от УВ до рассматриваемой точки. В промежутке  $X = 1 \div 3$  м зависимости совпадают как по «макропараметру», каковым является температура (кривые 3, 4), так и по концентрации ОН (кривые 1, 2), молярная доля которого в составе продуктов сгорания меньше 1%. Дальнейшие различия, а именно рост температуры и концентрации ОН, связаны с существованием области течения с нестационарной пересжатой ДВ (см. рис. 3). Резкое падение температуры и концентрации ОН при  $X \approx 1.8$  м (см. рис. 4) соответствует разрыву, образованному в результате взаимодействия волны горения и головной УВ ( $t \approx 1$  мс, рис. 1, а; 2, а). На рис. 5 полученные нами данные представлены в сравнении с результатами расчета (кривые 1, 2) и экспе-

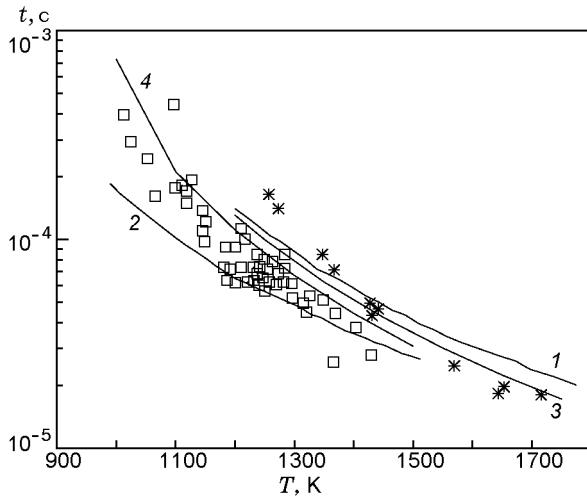


Рис. 5. Задержка воспламенения в стационарной ДВ:

кривые 1, 2 — расчетные данные [3], точки — эксперимент [3], кривые 3, 4 — расчет настоящей работы

риментов [3] (значки). При расчете кривой 3 уравнение (17) решалось при фиксированных давлении и температуре, а при расчете кривой 4 — при фиксированных плотности и внутренней энергии. При этом критерии воспламенения использовались те же, что и в [3]: максимум скорости изменения концентрации  $H_2O$  и максимум скорости роста температуры соответственно.

Результаты расчетов экспериментов [4] в стационарной и нестационарной постановках приведены в таблице и на рис. 6, 7. В таблице представлены результаты расчета: скорость равновесной детонации Чепмена — Жуке  $D_{чж}$ , молярная доля стехиометрической составляющей горючей смеси [4]  $x_{ст}$ , скорость и температура за УВ в момент прохождения волной трех измерительных секций (см рис. 1), время задержки времени воспламенения, опре-

Номер опыта	$n$	$k$	$D$ , м/с	$T$ , К	$\tau_1$ , мкс	$\tau_2$ , мкс	$\tau_{exp}$ , мкс	$\tau_{1c}$ , мкс	$\tau_{2c}$ , мкс	$p_0$ , атм	$p_{квд}$ , атм	$D_{exp}$ , м/с	$T_1$ , К	$T_2$ , К
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
◇ Смесь № 1: 3 % ( $O_2 + 2H_2$ ) + 97 % Ar, $D_{чж} = 783$ м/с, $x_{ст} = 0.03$														
10	2	1	1 040	1 200	22	139	96	96	153	0.06	2.63	1 100	1 312/1 486	1 161
		2	1 078	1 268	145	109	96	96	153	0.06	2.63	1 100	1 312/1 486	1 161
		3	1 078	1 270	132	98	96	96	153	0.06	2.63	1 100	1 312/1 486	1 161
12	2	1	1 206	1 525	36	64	30	25	58	0.06	4.58	1 240	1 597/1 779	1 452
		2	1 214	1 541	33	60	30	25	58	0.06	4.58	1 240	1 597/1 779	1 452
		3	1 214	1 542	32	59	30	25	58	0.06	4.58	1 240	1 597/1 779	1 452
+ Смесь № 2: 5 % ( $O_2 + 2H_2$ ) + 95 % Ar, $D_{чж} = 944$ м/с, $x_{ст} = 0.05$														
17	2	1	1 150	1 384	37	94	36	25	70	0.06	3.13	1 196	1 477/1 760	1 228
		2	1 158	1 400	33	85	36	25	70	0.06	3.13	1 196	1 477/1 760	1 228
		3	1 158	1 402	33	85	36	25	70	0.06	3.13	1 196	1 477/1 760	1 228
□ Смесь № 3: 8 % ( $O_2 + H_2$ ) + 92 % Ar, $D_{чж} = 1 005$ м/с, $x_{ст} = 0.06$														
32	1	1	1 126	1 313	13	22	23	13	30	0.12	3.85	1 120	1 302/1 609	992
		2	1 116	1 294	14	24	23	13	30	0.12	3.85	1 120	1 302/1 609	992
		3	1 115	1 292	15	25	23	13	30	0.12	3.85	1 120	1 302/1 609	992
33	1	1	1 157	1 372	22	247	34	22	75	0.06	2.10	1 136	1 332/1 645	1 027
		2	1 118	1 297	28	88	34	22	75	0.06	2.10	1 136	1 332/1 645	1 027
		3	1 118	1 297	28	88	34	22	75	0.06	2.10	1 136	1 332/1 645	1 027
34	1	1	1 178	1 412	15	65	20	11	53	0.06	2.98	1 207	1 469/1 800	1 180
		2	1 187	1 430	14	61	20	11	53	0.06	2.98	1 207	1 469/1 800	1 180
		3	1 188	1 431	14	61	20	11	53	0.06	2.98	1 207	1 469/1 800	1 180
35	1	1	1 181	1 417	15	64	18	10.8	54	0.06	3.02	1 210	1 475/1 807	1 187
		2	1 190	1 436	14	61	18	10.8	54	0.06	3.02	1 210	1 475/1 807	1 187
		3	1 191	1 437	14	61	18	10.8	54	0.06	3.02	1 210	1 475/1 807	1 187

Продолжение таблицы

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
41	2	1	1335	1737	5	33	8.2	4.2	27	0.06	5.53	1348	1766/2111	1500
		2	1356	1784	4	26								
		3	1356	1784	4	26								
× Смесь № 4: 5 % (O <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> ) + 95 % Ar, D <sub>чж</sub> = 844 м/с, x <sub>ст</sub> = 0.0375														
51	2	1	1194	1479	20	30	21.4	13	25	0.06	3.93	1216	1525/1746	1346
		2	1201	1494	19	28								
		3	1202	1495	19	28								
54	2	1	1330	1771	7	12	8.2	6.3	11	0.06	6.62	1350	1818/2043	1647
		2	1338	1790	6	11								
		3	1338	1791	7	11								
∇ Смесь № 5: 5 % (5O <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> ) + 95 % Ar, D <sub>чж</sub> = 590 м/с, x <sub>ст</sub> = 0.0125														
57	2	1	1133	1370	44	56	42	33	52	0.06	3.78	1140	1383/1460	1327
		2	1136	1376	44	54								
		3	1136	1376	44	54								
62	2	1	1472	2130	15	5	6.2	5	5.8	0.06	12.83	1480	2151/2220	2102
		2	1475	2137	14	5								
		3	1475	2138	14	5								
* Смесь № 6: 5 % (O <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> ) + 95 % Ar, D <sub>чж</sub> = 785 м/с, x <sub>ст</sub> = 0.03														
77	—	1	907	953	515	877	170	141	213	0.12	3.35	1000	1106/1269	953
		2	907	954	123	551								
		3	907	954	80	—								
79	—	1	929	989	724	762	189	218	331	0.06	1.83	1020	1140/1306	989
		2	929	989	339	—								
		3	929	989	280	—								
81	1	1	1061	1213	6	89	70	64	103	0.12	4.37	1060	1211/1381	1062
		2	1042	1178	86	125								
		3	1039	1173	43	128								
83	1	1	1059	1209	10	135	83	64	116	0.09	3.57	1080	1248/1419	1100
		2	1074	1236	96	119								
		3	1068	1226	84	124								
95	2	1	1190	1460	18	30	15.6	13	58	0.12	7.75	1200	1480/1659	1336
		2	1196	1471	18	30								
		3	1196	1471	18	30								
104	2	1	1503	2170	4	10	6	3.1	6.2	0.06	12.78	1520	2214/2387	2090
		2	1508	2184	4	10								
		3	1509	2186	4	10								
105	2	1	1510	2189	3	7	4	2	6.2	0.09	19.11	1520	2214/2390	2087
		2	1514	2200	3	7								
		3	1515	2200	3	7								
○ Смесь № 7: 5 % (O <sub>2</sub> + 12H <sub>2</sub> ) + 95 % Ar, D <sub>чж</sub> = 587 м/с, x <sub>ст</sub> = 0.0115														
110	2	1	1252	1582	25	34	29	17	33	0.12	11.28	1260	1599/1671	1546
		2	1254	1587	25	34								
		3	1255	1588	25	34								
111	2	1	1292	1668	18	26	20	13	25	0.12	13.01	1300	1685/1758	1632
		2	1294	1673	18	25								
		3	1295	1674	18	26								

Продолжение таблицы

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
● Смесь № 8: 11 % (O <sub>2</sub> + 10H <sub>2</sub> ) + 89 % Ar, D <sub>чж</sub> = 794 м/с, x <sub>ст</sub> = 0.03														
120	—	1 2 3	928 928 928	931 931 931	837 444 —	1 217 — —	130	159	223	0.12	3.47	1 020	1 073/1 236	931
124	1	1 2 3	1 144 1 101 1 104	1 282 1 208 1 213	58 28 55	57 81 79	70	43	70	0.12	5.13	1 110	1 223/1 394	1 087
125	2	1 2 3	1 193 1 200 1 201	1 372 1 385 1 386	29 28 27	43 41 40	36.1	16	51	0.09	5.77	1 210	1 404/1 581	1 271
■ Смесь № 9: 21 % (O <sub>2</sub> + 20H <sub>2</sub> ) + 79 % Ar, D <sub>чж</sub> = 815 м/с, x <sub>ст</sub> = 0.03														
140	1	1 2 3	1 036 1 167 1 290	989 1 183 1 387	49 2 18	36 58 24	88	87	132	0.12	4.81	1 120	1 111/1 278	988
141	2	1 2 3	1 314 1 322 1 322	1 428 1 441 1 442	27 25 25	40 38 38	35.4	15	35	0.06	5.73	1 337	1 468/1 644	1 353
143	2	1 2 3	1 341 1 344 1 345	1 476 1 481 1 482	11 10 10	17 15 15	12.2	8.5	15	0.12	12.03	1 350	1 491/1 668	1 377
151	2	1 2 3	1 818 1 820 1 820	2 460 2 465 2 465	1 1 1	4 4 3	2.5	0.3	4	0.06	36.49	1 820	2 465/2 564	2 409

деленное по двум критериям:  $\tau_1$  — время начала роста температуры за УВ,  $\tau_2$  — время максимума ОН после прохождения УВ (графы 4–7 соответственно); данные экспериментов [4]: начальное давление (графа 11), лабораторное время задержки воспламенения  $\tau_{exp}$  (графа 8) и скорость «стационарной» ДВ (графа 13); рассчитанные по стационарной методике величины: время задержки воспламенения (графы 9, 10), температура в точках непосредственно за УВ и (через косую) на равновесной детонационной адиабате (графа 14), а также температура между УВ и контактном разрывом после начального распада разрыва (графа 15); давление в КВД, найденное из решения задачи о распаде разрыва в равновесно реагирующем газе (графа 12); реализующийся в расчете «номер режима формирования перешагной ДВ» (графа 2, прочерк соответствует отсутствию корреляции между расчетными и экспериментальными данными); номер измерительной секции (графа 3). На рис. 6 по оси ординат, в соответствии с [4], отложено произведение лабораторного времени задержки воспла-

менения на давление за УВ, выраженное в атмосферах, и на молярную долю стехиометрической составляющей смесей № 1–9 (см. таблицу)  $\tau_p = \tau_p x_{ст} / p_0$ . Как правило, экспериментальные значения «приведенного времени» лежат в области между рассчитанными. На рис. 6 также дано время выхода системы в состояние термодинамического равновесия, для оценки которого используется момент лабораторного времени, когда выполняется равенство  $y_p = \frac{1}{T} \frac{dT}{d\xi}$ , соответствующее значению  $\xi$ , при котором температура смеси изменится на  $y_p T$  при перемещении УВ на расстояние 1 м и сохранении темпов изменения температуры. Приведены времена, соответствующие  $y_p = 0.001$  (звездочки) и 0.01 (квадраты). Видно, что время выхода в состояние равновесия, в отличие от времени задержки воспламенения, слабо зависит от температуры за УВ.

На рис. 7 представлена зависимость от начальной температуры за УВ модуля относительного отличия ( $\delta = |(D - D_{exp}) / D_{exp}|$ ) скорости УВ, полученной в результате решения



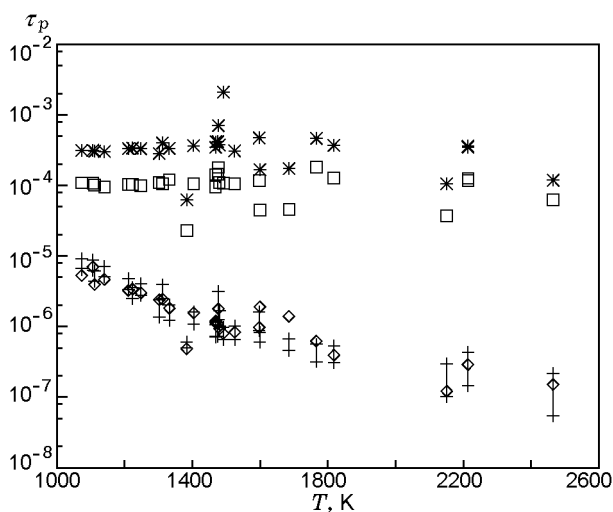


Рис. 6. Зависимость приведенного лабораторного времени от температуры:

◇ — эксперимент [4], + — рассчитанные значения  $\tau_1$ ,  $\tau_2$ ; \*, □ — время выхода на равновесие с точностью до 1 и 0.1 % соответственно

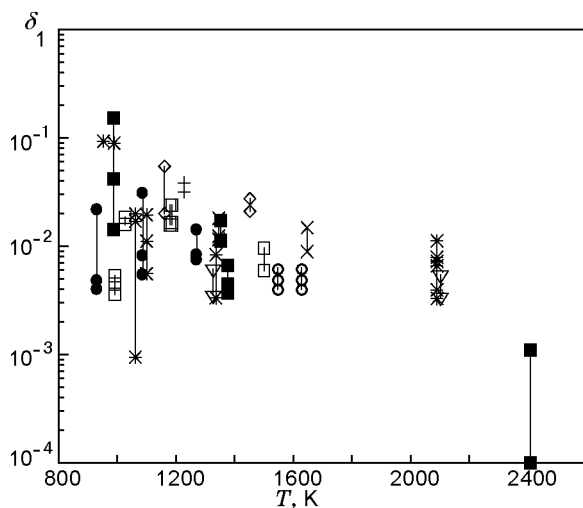


Рис. 7. Зависимость относительной погрешности скорости головной УВ, рассчитанной по нестационарной методике, от начальной температуры за УВ (графа 15 таблицы):

значки соответствуют обозначениям смесей в таблице

нестационарной задачи в момент прохождения ударной волной датчика, и скорости, измеренной в экспериментах. В ряде экспериментов (№ 10, 12, 17, 33) выход на стационарный режим распространения ДВ наблюдался на втором и третьем датчиках, при этом скорость

распространения ДВ отличалась от теоретического значения более чем на 2 %, точный выход на которое осуществляется на расстояниях, существенно превышающих размеры экспериментальной установки. В этих случаях подъем давления в КВД значительно улучшает соответствие расчетных и экспериментальных данных. Например, при моделировании эксперимента № 12 подъем давления в КВД до 510 кПа приводил к тому, что скорость УВ, фиксируемая первым датчиком, достигала 1232 м/с, вторым — 1238.9 м/с, третьим — 1239.5 м/с, однако при этом скорость стационарной ДВ составляет 1325.9 м/с. Первый тип режима формирования ДВ наблюдался в экспериментах № 32–35, 81, 83, 123, 139 с начальной температурой  $990 \div 1200$  К, второй — в экспериментах № 10, 12, 17, 41, 51, 54, 57, 62, 95, 104, 105, 109, 110, 124, 140, 142, 150 с начальной температурой  $1200 \div 2400$  К. При моделировании экспериментов № 77, 79, 119 при начальной температуре менее 950 К детонационная волна не формируется и, соответственно, не выходит на режим распространения, близкий к стационарному.

## ВЫВОДЫ

1. В рамках модели невязкого, нетеплопроводного многокомпонентного реагирующего газа разработаны вычислительные алгоритмы и комплекс программ для моделирования тонкой структуры стационарной и нестационарной детонационной волны.

2. Проведено численное моделирование экспериментов [4] в ударной трубе по определению задержки воспламенения в стационарных пересечках ДВ в горючих смесях водорода с кислородом, разбавленных аргоном. Показано, что кинетический механизм, предложенный в [6], описывает эксперименты [4] при температурах за падающей УВ более 950 К и завышает значения времени задержки воспламенения при температурах менее 950 К.

3. В экспериментах, проводимых при начальных температурах менее 1250 К, необходимо учитывать наличие участка существенно нестационарного распространения ДВ.

4. При отработке кинетических механизмов детонационного горения и их сопоставлении с экспериментами в ударной трубе необходимо учитывать «степень стационарности» ДВ и время перехода продуктов сгорания в равновесное состояние.

5. Существенные отличия результатов расчетных и экспериментальных исследований, наблюдаемые при температурах ниже 950 К, требуют дальнейших исследований. Отличия, по-видимому, связаны как с необходимостью корректировки констант скоростей химических реакций, так и с идеальностью используемой математической модели, а именно с тем, что не учитываются многомерность течения, эффекты вязкости, теплопроводности и диффузии, неидеальность разрыва мембраны и т. д.

### ЛИТЕРАТУРА

1. **Димитров В. И.** Простая кинетика. — Новосибирск: Наука, 1982.
2. **Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р.** Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. — М.: Физматлит, 2003.
3. **Бедарев И. А., Федоров А. В.** Сравнительный анализ трех математических моделей воспламенения водорода // Физика горения и взрыва. — 2006. — Т. 42, № 1. — С. 26–33.
4. **Павлов В. А.** Некоторые особенности измерения и интерпретации времени индукции воспламенения водородокислородных смесей за фронтом ударной волны // Физ.-хим. кинетика в газ. динамике. — 2009. — Т. 8.
5. **Гурвич Л. В., Вейц И. В., Медведев В. А. и др.** Термодинамические свойства индивидуальных веществ: справочное изд. в 4 т. — М.: Наука, 1978.
6. **Ибрагимов Л. Б., Смехов Г. Д., Шаталов О. П.** Сравнительный анализ констант скоростей химических реакций, описывающих горение водородокислородных смесей // Физ.-хим. кинетика в газ. динамике. — 2009. — Т. 8.
7. **Гидаспов В. Ю., Пирумов У. Г., Северина Н. С.** Математическое моделирование квазиодномерных нестационарных течений реагирующего газа с произвольным числом взаимодействующих разрывов // Вестн. МАИ. — 2008. — Т. 15, № 5. — С. 83–94.
8. **Volkov V. A., Gidasпов V. Yu.** Numerical simulation of initiating detonation with the help of strong shock waves // Proc. of the 2nd Japan-Soviet Union Joint Symposium on Computational Fluid Dynamics. — 1991. — V. 2. — P. 80–88.
9. **Гидаспов В. Ю.** Вычислительный алгоритм решения задачи о распаде произвольного разрыва в равновесно-реагирующем газе // Мат. моделирование. — 2006. — Т. 18, № 8. — С. 64–76.
10. **Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П.** Численное решение многомерных задач газовой динамики. — М.: Наука, 1976.
11. **Гидаспов В. Ю.** Распад разрыва в детонирующем газе // Вестн. МАИ. — 2010. — Т. 17, № 6. — С. 72–79.
12. **Зельдович Я. Б., Компанец А. С.** Теория детонации. — М.: ГИТТЛ, 1955.
13. **Гидаспов В. Ю., Северина Н. С.** Численное моделирование экспериментов по определению времени задержки воспламенения в ударных трубах // Вестн. МАИ. — 2009. — Т. 16, № 6. — С. 182–192.

*Поступила в редакцию 6/IV 2012 г.*