

ПЕРЕХОДНЫЕ РЕЖИМЫ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВОЛН В МЕТАСТАБИЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

Н. Н. Смирнов, В. Ф. Никитин, Ш. Алиари Шурехдели

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119992 Москва
ebifsun1@mech.math.msu.su

Приведены результаты теоретического исследования процессов перехода горения в детонацию в водородовоздушных смесях. Исследована зависимость сценария перехода горения в детонацию от значений определяющих параметров: начальной температуры смеси, энергии зажигания, времени зажигания, геометрических характеристик камер и расстояний между ними в зоне зажигания.

Ключевые слова: горение, детонация, переходный процесс, газ.

ВВЕДЕНИЕ

Анализируя исследования процесса инициирования детонации в результате локального выделения энергии, можно выделить два различных сценария. Первый реализуется при возникновении в газе достаточно сильной ударной волны, за которой в результате повышения температуры и давления происходит активация химических реакций, энерговыделение в которых приводит в дальнейшем к поддержанию скорости волны на уровне скорости самоподдерживающейся детонации, т. е. не затухающей и не зависящей от энергии инициирования. Исследования такого сценария инициирования детонации проведены с большой полнотой и представлены в работах [1–5].

Второй сценарий инициирования детонации может реализоваться в случае, когда образующаяся при локальном энерговыделении ударная волна не обладает достаточной интенсивностью, чтобы активировать химические реакции до своего затухания, но нагрев в очаге выделения энергии достаточен для активирования химических реакций. В этом случае из очага энерговыделения («зажигания») распространяется волна нормального горения, в которой механизмом активации реакции в последующих слоях смеси является не их ударное сжатие в волне, а прогрев в результате теплопередачи от сгоревших слоев газа. Распространяющаяся по газу волна горения приводит к ускорению и турбулизации потока перед фронтом, что, в свою очередь, ведет к повыше-

нию скорости распространения турбулентного пламени. Волны сжатия перед фронтом приводят к формированию одной или нескольких догоняющих друг друга ударных волн. В результате возможны либо стабилизация скорости распространения пламени, либо возникновение детонации с последующей стабилизацией ее скорости на уровне самоподдерживающегося режима. Такой процесс инициирования детонации получил название перехода горения в детонацию. В данной работе мы ограничимся рассмотрением именно таких процессов, а точнее, изучим подробно возможные механизмы переходных процессов и их чувствительность к изменению внешних определяющих параметров.

Исследования перехода горения в детонацию (ПГД) в смесях водорода с воздухом [6–9], а затем в смесях углеводородов с воздухом [10, 11] показали множественность сценариев перехода. Различные механизмы возникновения детонации зависят от конкретной структуры течения, созданного ускоряющимся пламенем, что делает процесс перехода горения в детонацию не воспроизводимым экспериментально во всех деталях и мельчайших подробностях. В настоящее время существуют различные точки зрения на механизм ПГД: «взрыв во взрыве» Опенгейма [6] и градиентный механизм «спонтанного горения» Я. Б. Зельдовича [12].

Последующий теоретический анализ показал, что на микроуровне увеличение неравномерности распределения температуры и рост градиентов концентраций в окрестности локальных экзотермических центров («горячих точек») перед фронтом пламени могут быть

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 05-03-32232 и 08-03-00190).

достаточными для развития из отдельно взятого очага как волны детонации, так и волны нормального горения [13–19]. Анализ теоретических и экспериментальных результатов показал, что самовоспламенение в одной или нескольких горячих точках перед ускоряющимся пламенем с последующим развитием детонации или горения из каждого локального экзотермического центра является причиной существования множества сценариев перехода горения в детонацию [20]. Ударные волны возникают вследствие инициирования и действия пламени как сферического ускоряющегося поршня. Отражение волн сжатия от стенок сосуда или от контактной поверхности между горючей смесью и окружающим воздухом приводит к циркуляции волн, амплитуда которых может увеличиваться в результате взаимодействия с пламенем [21–23]. Общей чертой всех этих сценариев является формирование локальных экзотермических центров по стохастическому механизму Опенгейма с последующим развитием детонации на микроуровне согласно спонтанному механизму Зельдовича [20]. Первые исследования ПГД в рамках модели Навье — Стокса [24] также неявно свидетельствуют об этом эффекте. Изучение ПГД при взаимодействии отраженной ударной волны с ламинарным пламенем [25, 26] также показали, что переход к детонации в горячих точках идет по градиентному механизму, в то время как взаимодействие ударной волны и волны горения, а также локальные неоднородности потока создают условия для возникновения самих горячих точек.

Промотирование перехода горения в детонацию возможно при введении в канал дополнительных турбулизаторов, таких как спираль Шелкина [27], пластины с отверстиями, перекрывающие сечение [28], форкамеры большего диаметра в секции зажигания [10]. Распространение пламени в каналах сложной геометрии и в пористых средах исследовано в работе [29]. В открытом пространстве переход горения в детонацию экспериментально никто не наблюдал, и в известных расчетах такой переход не был реализован.

Кинетика химических реакций также играет существенную роль при переходе горения в детонацию. В работе [30] впервые показано, что вопреки общепринятым представлениям воспламенение и горение смеси водорода с воздухом, в том числе и при атмосферном дав-

лении в области третьего предела, протекают почти целиком по разветвленно-цепному механизму. Конкуренция реакций разветвления и обрыва цепей наряду с саморазогревом определяет кинетику процесса в целом. Введение малых добавок, приводящих к обрыву цепей, в состоянии существенно ингибировать ПГД.

Экспериментальные исследования пульсирующих режимов возбуждения детонации в смесях углеводородных топлив с воздухом проводились в двухкамерной детонационной установке переменной геометрии. Детальное описание процедуры и оборудования для этих экспериментов содержится в работе [20].

Влияние геометрии рабочей зоны на ускорение турбулентного пламени и развитие детонации или дефлаграции исследовалось с использованием камер, объем которых мог меняться от эксперимента к эксперименту. Боковые стенки камер имели резьбу на внутренней поверхности, что позволяло ввинчивать цилиндрические перегородки на различную глубину внутрь камер, меняя их объем. Смесь поджигалась в первой камере. Поток газа, обусловленный расширением зоны горения, был сильно турбулизован из-за геометрии устройства. Подъем давления в обеих камерах приводил к закрытию обратного клапана, а расширение продуктов сгорания в узкую трубу вызывало дополнительное ускорение пламени за счет поршневого эффекта, что улучшало условия развития ПГД.

Результаты исследований показали, что для бензиновоздушной смеси при использовании двух форкамер преддетонационное расстояние сокращалось до $1.5 \div 2.0$ м в трубах диаметром 22 мм [11, 20, 31]. Наличие форкамер вызывало появление существенных неоднородностей в потоке перед зоной пламени, что может приводить к возникновению детонации. Поршневой эффект, создаваемый расширяющимися продуктами горения смеси в камерах, порождает серию первичных ударных волн, движущихся перед фронтом пламени. Некоторые волны образуются в результате взаимодействия поперечных волн сжатия, возникающих при ускорении турбулентного пламени. Пламя распространяется со скоростью до 950 м/с. Анализ экспериментов показал, что детонация формируется в одном из экзотермических центров (в «горячей точке»), расположенном в области сжатого газа между головной ударной волной и зоной горения. В зависимости от ло-

кальной структуры и расположения горячих точек горение может привести либо к детонации, либо к дефлаграции, распространяющейся от одной из горячих точек [20].

Неоднородности в зоне сжатого газа перед фронтом пламени могут возникать, в частности, вследствие взаимодействия ударных волн, идущих впереди. Взаимодействие в газе двух ударных волн, одна из которых догоняет другую, приводит к образованию одной ударной волны, распространяющейся в ту же сторону, а также к образованию отраженной центрированной волны разрежения и контактной поверхности между ними, разделяющей газы различной температуры и плотности. Горячие точки перед фронтом пламени, порождающие волны детонации или дефлаграции, образуются именно на контактных поверхностях, являющихся результатом взаимодействия догоняющих друг друга головных ударных волн. Теоретическое объяснение этого факта впервые было предложено в работе [18], где было показано, что самовоспламенение в области ударно-сжатого газа происходит в отдельном экзотермическом центре, характеризуемом минимальным временем задержки воспламенения, которое зависит от температуры смеси и от физического времени экспозиции смеси при данной температуре. Температура газа, сжатого головной ударной волной, перед контактной поверхностью выше, чем температура газа за контактной поверхностью, прошедшего последовательно две стадии — ударного сжатия и адиабатического расширения. Время индукции воспламенения с повышением температуры сокращается. В области течения между контактной поверхностью и ударной волной слой газа, примыкающие к контактной поверхности, характеризуются самым коротким временем индукции, так как они дольше всего находились при повышенной температуре. Поэтому самовоспламенение происходит в горячей точке на контактной поверхности. Эти рассуждения подтверждаются и результатами прямого численного моделирования [18, 20].

После воспламенения газа в отдельном экзотермическом центре градиенты температуры и концентрации реагентов, установившиеся в окрестности зоны воспламенения, определяют, что разовьется из данного очага — волна детонации или же волна дефлаграции [12]. При возникновении волны дефлаграции, которая распространяется от места воспламе-

нения с гораздо меньшей скоростью, возможно последующее воспламенение соседних горячих точек, до которых волна дефлаграции еще не успела дойти.

Целью настоящей работы является исследование влияния определяющих параметров: начальной температуры смеси, энергии зажигания, времени зажигания, геометрических характеристик камер и расстояний между ними в зоне зажигания — на развитие того или иного сценария перехода горения в детонацию в водородовоздушной смеси.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Численные исследования процессов ПГД проводились с помощью системы уравнений, полученной осреднением по Фавру системы уравнений движения многокомпонентной смеси. Использовалась модифицированная k - ε -модель турбулентности. Для моделирования флуктуаций температуры к основным уравнениям этой модели было добавлено третье уравнение, описывающее динамику среднеквадратичного отклонения температуры [32]. Члены, отвечающие за производство и диссипацию этого параметра, а также нелинейные по температуре члены, отвечающие за скорость химических реакций, моделировались с применением метода квадратур Гаусса [33].

Система определяющих уравнений для осредненных величин газодинамических параметров имеет следующий вид:

$$\partial_t(\rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1)$$

$$\partial_t(\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) = -\nabla \cdot \mathbf{I}_k + \dot{\omega}_k, \quad (2)$$

$$\partial_t(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \rho \mathbf{g} - \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho E) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} E) = \\ = \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{g} - \nabla \cdot \rho \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{I}_q + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \mathbf{u}). \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь ρ — плотность, \mathbf{u} — вектор скорости, Y_k — массовая концентрация k -го компонента, \mathbf{I}_k — турбулентный диффузионный поток k -го компонента, $\dot{\omega}_k$ — скорость образования k -го компонента, \mathbf{g} — ускорение свободного падения, p — давление, E — удельная энергия, \mathbf{I}_q — турбулентный поток энергии, $\boldsymbol{\tau}$ — тензор напряжений.

Система (1)–(4) включает уравнение неразрывности для смеси в целом, уравнения

баланса массы для k -го компонента, уравнения количества движения и энергии для смеси. Наряду с ними должны также выполняться условия согласования: $\sum_k Y_k = 1$, $\sum_k \mathbf{I}_k = 0$, $\sum_k \dot{\omega}_k = 0$. Термическое и калорическое уравнения состояния для смеси газов имеют соответственно следующий вид:

$$p = R_g \rho T \sum_k \frac{Y_k}{W_k},$$

$$E = \sum_k Y_k (c_{v,k} T + h_{0k}) + \frac{\mathbf{u}^2}{2} + k,$$

где T — температура, R_g — универсальная газовая постоянная, W_k — молекулярная масса k -го компонента, $c_{v,k}$ — удельная теплоемкость при постоянном объеме, h_{0k} — химическая энергия k -го компонента, k — кинетическая энергия турбулентности. Турбулентный тепловой поток в уравнении (4) представляется в виде суммы двух членов: $\mathbf{I}_q = \mathbf{J}_q + \sum_k \mathbf{I}_k (c_{p,k} T + h_{0k})$, где \mathbf{J}_q играет роль кондуктивного теплового потока для турбулентного течения, а добавочный член характеризует перенос энергии в результате турбулентной диффузии; $c_{p,k}$ — удельная теплоемкость k -го компонента при постоянном давлении. Кинематическая турбулентная вязкость ν^t в рамках k - ε -модели определяется по формуле $\nu^t = C_\mu k^2 / \varepsilon$, где ε — диссипация турбулентной энергии. Для определения турбулентных потоков используются следующие соотношения:

$$\tau = (\mu + \rho \nu^t) \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{U} \right) - \frac{2}{3} \rho k \mathbf{U}, \quad (5)$$

$$\mathbf{I}_k = -\rho \left(D + \frac{\nu^t}{\sigma_d} \right) \nabla \cdot Y_k,$$

$$\mathbf{J}_q = - \left(\lambda + \sum_k c_{p,k} Y_k \rho \frac{\nu^t}{\sigma_t} \right) \nabla \cdot T. \quad (6)$$

Здесь $\nabla \mathbf{u}^T$ — транспонированная матрица тензора $\nabla \mathbf{u}$, \mathbf{U} — единичный тензор, D — коэффициент диффузии, λ — теплопроводность, μ — вязкость, σ_d , σ_t — константы.

Рождение k -го компонента в результате химической реакции происходит со скоростью $\dot{\omega}_k$, которая является суммой массовых скоростей $\omega_{k,j}$ всех реакций, протекающих в газовой фазе. Члены $\dot{\omega}_k$ в уравнениях, отвечающие за химические превращения, обычно крайне чувствительны к колебаниям температуры в турбулентном потоке, поскольку содержат экспоненциальные зависимости типа аррениусовской для определения скоростей элементарных реакций. Поэтому влияние флуктуаций температуры в турбулентном потоке при наличии химических реакций необходимо учитывать. Влиянием флуктуаций концентраций реагентов будем пренебрегать, поскольку зависимость скоростей реакций от концентраций не столь сильная (полиномиальная). Температуру будем рассматривать в дальнейшем как стохастическую функцию T со средним значением \overline{T} и среднеквадратичным отклонением $\theta = \overline{T'T'}$. Для замыкания системы используются дополнительные уравнения k - ε -модели для определения энергии турбулентных пульсаций k и диссипации ε , к которым добавляется третье уравнение для определения среднеквадратичного отклонения температуры $\theta = \overline{T'T'}$:

$$\partial_t (\rho k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} k) = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \rho \frac{\nu^t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + \tau^t : \nabla \mathbf{u} - \rho \varepsilon, \quad (7)$$

$$\partial_t (\rho \varepsilon) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \varepsilon) = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \rho \frac{\nu^t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{1\varepsilon} \tau^t : \nabla \mathbf{u} - C_{2\varepsilon} \rho \varepsilon), \quad (8)$$

$$\partial_t (\rho \tilde{c}_p \theta) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \tilde{c}_p \theta) = \nabla \cdot \left(\left(\lambda + \sum_k c_{p,k} Y_k \rho \frac{\nu^t}{\sigma_k} \right) \nabla \theta \right) + P_\theta + W_\theta - D_\theta, \quad (9)$$

где τ^t — тензор турбулентных напряжений, двоеточием обозначена операция двойной свертки для тензоров второго ранга, а члены, характеризующие производство P_θ , W_θ и диссипацию D_θ величины θ , определяются следующими формулами:

$$P_\theta = 2\rho \sum_k c_{p,k} Y_k \rho \frac{\nu^t}{\sigma_k} (\nabla T)^2,$$

$$W_\theta = - \sum_k \overline{\dot{\omega}'_k T'} h_{0k}, \quad (10)$$

$$D_\theta = C_g \rho \sum_k c_{p,k} Y_k \frac{\varepsilon}{k} \frac{\theta}{\theta_{\max} - \theta}, \quad \bar{c}_p = \sum_k c_{p,k} Y_k.$$

При определении членов производства при химических реакциях W_θ использовался закон Аррениуса. Для расчета конкретных членов $\overline{\dot{\omega}'_k T'}$ применялась техника квадратур Гаусса [33]:

$$\overline{T' A(T)} = \theta \frac{A(\bar{T} + \sqrt{3\theta}) - A(\bar{T} - \sqrt{3\theta})}{2\sqrt{3\theta}}. \quad (11)$$

Вид функции D_θ , характеризующей диссипацию, определялся исходя из предположения, что флуктуации температуры ограничены таким образом, чтобы величина $T = \bar{T} + T'$ не могла принимать отрицательные значения. Поэтому в формулу введен множитель $1/(\theta_{\max} - \theta)$. Чтобы оценить величину θ_{\max} , примем во внимание следующие соображения. Во-первых, для нормальной функции распределения вероятность того, что среднеквадратичное отклонение вдвое превысит среднее значение, оказывается менее 1 %. Во-вторых, среднее отклонение температуры в экспериментах [34] не превосходило половины максимума осредненного значения. Поэтому для θ_{\max} была использована следующая оценка:

$$\theta_{\max} = \bar{T}^2 / 4.$$

Константы k - ε -модели определялись стандартным образом:

$$C_\mu = 0.09, \quad C_{1\varepsilon} = 1.45, \quad C_{2\varepsilon} = 1.92,$$

$$\sigma_d = 1, \quad \sigma_t = 0.9, \quad \sigma_k = 1, \quad \sigma_\varepsilon = 1.3.$$

Константа C_g в уравнении (10) для вычисления диссипации определялась с использованием экспериментальных данных [34]:

$$C_g = 2.8. \quad (12)$$

Источниковый член в уравнении (9) для среднеквадратичной пульсации температуры, определяемый химическими реакциями (10), принимает вид

$$W_\theta = -T' \sum_{j=1}^B \sum_{k=1}^K h_{0k} \dot{\omega}_{k,j}, \quad (13)$$

где $\dot{\omega}_{k,j}$ — скорость образования k -го компонента в j -й реакции, B — число химических реакций, K — число компонентов. Каждый член $\dot{\omega}_{k,j}$ содержит функцию Аррениуса для определения скорости j -й реакции. Чтобы определить член W_θ по формуле (13), необходимо рассчитать средние значения $\overline{T' \omega_{k,j}(T)}$ по формуле (11) и просуммировать, используя (13). Более детально методы осреднения нелинейных функций применительно к данной задаче обсуждаются в работе [32].

Для моделирования химических взаимодействий применяется кинетический механизм, состоящий из двенадцати газовых компонентов, включая радикалы, и тридцати пяти обратимых реакций между ними [35].

Для каждой химической реакции ее прямая скорость моделируется с использованием закона Аррениуса:

$$k_{f,r}(T) = A_r T^{n_r} \exp\left(-\frac{T_{a,r}}{T}\right). \quad (14)$$

Скорость соответствующей обратной реакции рассчитывается с учетом минимума потенциала Гиббса компонентов, участвующих в реакции при химическом равновесии:

$$k_{b,r}(T) = \frac{k_{f,r}(T)}{K_r(T)},$$

$$K_r(T) = \exp\left(-\frac{\sum_{k=1}^N (\nu''_{k,r} - \nu'_{k,r}) G_k^0(T)}{R_g T}\right) \times \left(\frac{p_{atm}}{R_g T}\right)^{\sum_{k=1}^N (\nu''_{k,r} - \nu'_{k,r})}.$$

Здесь p_{atm} — атмосферное давление (1.01325×10^5 Па), G_k^0 — стандартный потенциал Гиббса k -го компонента, приведенный к атмосферному давлению, ν' , ν'' — стехиометрические коэффициенты k -го компонента соответственно на входе и выходе r -й реакции.

С учетом закона действующих масс скорости образования компонентов смеси $\dot{\omega}_k$ выражаются через $k_{f,r}(T)$, $k_{f,b}(T)$, массу моля, массовые концентрации и стехиометрические коэффициенты компонентов следующим образом:

$$\dot{\omega}_k = W_k \sum_{r=1}^{N_r} (\nu''_{k,r} - \nu'_{k,r}) \left(k_{f,r}(T) \prod_{m=1}^N \left(\frac{\rho Y_m}{W_m} \right)^{\nu'_{m,r}} - k_{b,r}(T) \prod_{m=1}^N \left(\frac{\rho Y_m}{W_m} \right)^{\nu''_{m,r}} \right). \quad (15)$$

Здесь выражения, стоящие в скобках, представляют собой молярные концентрации соответствующих компонентов (в молях на единицу объема).

Граничными условиями для расчетной области служат условия на стенках и на оси симметрии. Граничные условия ставятся в следующих предположениях: стенки теплоизолированы и некаталитичны; скорость газа равна нулю на стенках; радиальная скорость, градиенты осевой скорости, температуры и концентраций равны нулю на оси симметрии:

$$\begin{aligned} x &= 0, \\ x &= x_i, \\ x &= X, \quad r_i \leq r \leq R_i: \\ u_x &= u_r = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial Y_k}{\partial x} = 0; \quad (16) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} r &= R_i, \quad x_i \leq x \leq x_{i+1}, \\ r &= r_i, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i, \quad i = 1, \dots, N-1: \\ u_x &= u_r = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0; \quad (17) \end{aligned}$$

$$r = 0, \quad 0 \leq x \leq X:$$

$$u_r = 0, \quad \frac{\partial u_x}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0. \quad (18)$$

Индексом i обозначены координаты мест сочленения детонационной трубы и встроенных в нее форкамер большего диаметра.

Значения кинетической энергии турбулентности k на стенках полагаются равными нулю, а на скорость диссипации ε накладываются условия Неймана:

$$k = 0, \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial n} = 0 \quad \text{на стенке.}$$

При этом в потоке значения коэффициентов C_μ , $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ модифицируются в зависимости от расстояния до ближайшей стенки по формулам Лэма — Бремхорста. В начальный момент зажигания моделируется выделением энергии в сферическом объеме, расположенном по оси трубы в центре первой форкамеры. Временной

профиль ввода в систему энергии зажигания берем в следующем виде:

$$Q_{ign} = Q_{ign}(t) = \begin{cases} E_{ign}/t_{ign} & \text{при } t \leq t_{ign}, \\ 0 & \text{при } t > t_{ign}, \end{cases}$$

где Q_{ign} — общий тепловой поток от источника зажигания, E_{ign} — полная энергия зажигания, t_{ign} — время экспозиции.

ТЕСТИРОВАНИЕ МОДЕЛИ

Верификация модели проводилась сравнением численных результатов с экспериментальными и расчетными значениями скорости детонации Чепмена — Жуге, скорости турбулентного горения, преддетонационной длины и преддетонационного времени.

Определенная на основе двумерных расчетов с использованием турбулентной модели скорость детонации Чепмена — Жуге при различных значениях коэффициента эквивалентности (ϕ) в водородовоздушной смеси сравнивалась с данными работы [36] и с данными одномерных расчетов. Анализ результатов, представленных на рис. 1, показывает, что двумерные расчеты дают заниженные значения скорости детонации, что, по-видимому, объясняется повышенной диссипацией энергии за счет трения, вносимой k - ε моделью турбулентности. Таким образом, погрешность модели для бедных смесей можно оценить в 5 %, а погрешность для богатых смесей — 10 %.

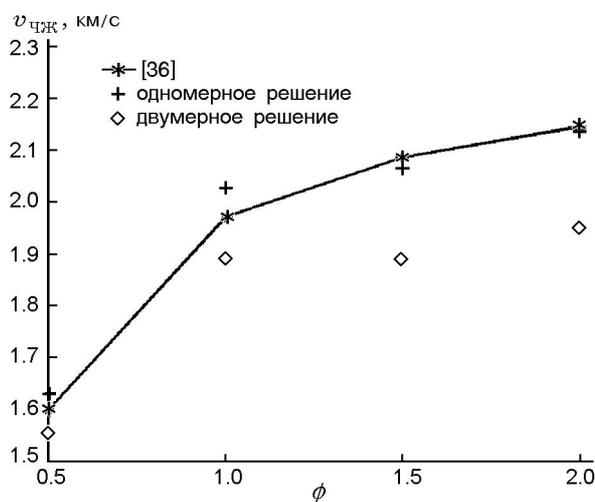


Рис. 1. Зависимость скорости детонации Чепмена — Жуге от коэффициента эквивалентности ϕ

Результаты расчета преддетонационного времени (t_d) в водородовоздушной смеси при различном объемном содержании азота (C_{N_2}) и экспериментальные данные [36] приведены на рис. 2. При относительно большом содержании азота результаты расчета хорошо согласуются с экспериментами.

Результаты расчета преддетонационной длины в водородовоздушной смеси при разных значениях ϕ и $\bar{T}_0 = 1.0$, $\bar{t}_{ign} = 0.10$, $\bar{E}_{ign} = 320$, $Re = 4$, $Sr = 0.130$, а также экспериментальные данные [37] приведены на рис. 3. Преддетонационная длина L_d дана в безразмерном виде:

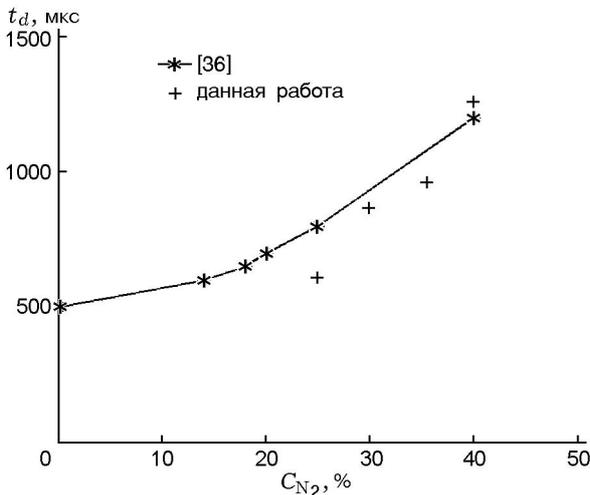


Рис. 2. Сравнение расчетных и экспериментальных результатов преддетонационного времени при горении водородовоздушной смеси

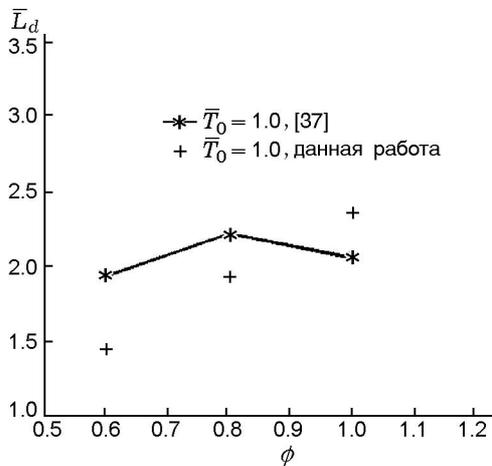


Рис. 3. Сравнение расчетных и экспериментальных результатов преддетонационной длины при горении водородовоздушной смеси

$\bar{L}_d = \left(\frac{L_d}{R}\right) \frac{10S_u}{a_p} (\sigma - 1)$, где R — радиус трубы, S_u — скорость ламинарного горения, a_p — изобарная скорость звука в продуктах горения, σ — отношение плотностей газа до реакции и после реакции. Результаты расчета хорошо согласуются с экспериментами.

Результаты экспериментов по измерению преддетонационной длины как функции начальной температуры смеси при ПГД, приведенные далее на рис. 11, также могут служить для верификации модели.

Для дальнейшего исследования удобно перейти к безразмерным переменным. Система уравнений (1)–(4), записанная в безразмерном виде, включает в себя следующие критерии и безразмерные параметры зажигания:

$$Re = \frac{\rho_{ref} \sqrt{k_0} l_{ref}}{\mu_{ref}}, \quad Sr = \frac{t_{ref} \sqrt{k_0}}{l_{ref}},$$

$$\bar{t} = \frac{t}{t_{ref}}, \quad \bar{x} = \frac{x}{x_{ref}}, \quad \bar{E}_{ign} = \frac{E_{ign}}{p_{ref} l_{ref}^3},$$

$$\bar{t}_{ign} = \frac{t_{ign}}{t_{ref}}, \quad \bar{T}_0 = \frac{T_0}{T_{ref}},$$

где l_{ref} — интегральный масштаб турбулентности, k_0 — энергия турбулентных пульсаций, x_{ref} — характерный пространственный масштаб, определяемый геометрией установки, $\mu_{ref} = \mu(T_{ref}) + \mu_t$, $t_{ref} = 10^{-3}$ с, $T_{ref} = 300$ К, $p_{ref} = 1$ бар, $\rho_{ref} = \frac{p_{ref}}{R_{ref} T_{ref}}$, $R_{ref} = 335.94$ Дж/(кг·К), $0.001 < x_{ref} < 0.05$ м, $0.001 < l_{ref} < 0.1$ м.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕХОДА ГОРЕНИЯ В ДЕТОНАЦИЮ

При $p_0 = 1$ бар и $\bar{T}_0 = 1.0$ распределение температуры на оси симметрии вдоль трубы в различные моменты времени приведено на рис. 4. Видно, что при переходе горения в детонацию (кривая 4) сначала формируется пережатая детонационная волна. С течением времени она постепенно ослабляется и выходит на режим Чепмена — Жуге.

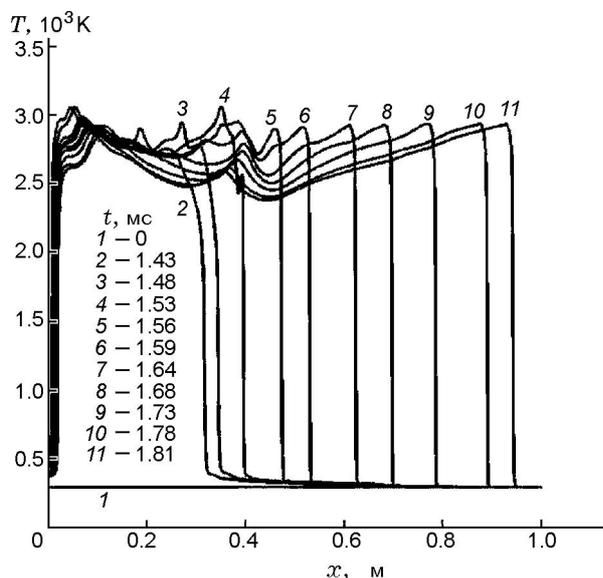


Рис. 4. Расчетные профили температуры в различные моменты времени при горении водородовоздушной стехиометрической смеси

Влияние камер в секции зажигания

Для изучения влияния наличия камер с расширенным поперечным сечением в зоне зажигания на развитие детонации было выполнено численное моделирование процесса в устройстве с переменным количеством камер (каверн большего поперечного сечения) на начальном участке, где осуществлялось зажигание водородовоздушной смеси при нормаль-

ных условиях.

На рис. 5 представлены распределения давления по четырехкамерной системе в различные моменты времени.

В момент времени $\bar{t} = 0.82$ фронт пламени входит в третью камеру. При этом давление в первой и второй камерах сильно повышается за счет выгорания в них топлива. Скорость газа на входе в четвертую камеру сильно возрастает.

К моменту времени $\bar{t} = 1.25$ фронт пламени выходит из четвертой камеры в трубу. Перед фронтом пламени заметно формирование ударной волны. На этой волне горение еще не начинается.

В момент времени $\bar{t} = 1.29$ происходит переход в детонационный режим. Очаги возникновения детонации находятся вблизи стенок. Давление и температура на фронте ударной волны сильно возрастают.

Влияние количества камер на преддетонационные длину и время изучали при варьировании числа камер от нуля до пяти. Безразмерный диаметр трубы полагался равным 8, безразмерный диаметр камер — 16, длина камер $\bar{L}_c = 8$, длина участков трубы, соединяющих камеры, $\bar{L}_b = 3.2$.

Рис. 6 иллюстрирует изменение скорости фронта реакции вдоль трубы. В двухкамерной трубе преддетонационные длина и время уменьшаются. Но наличие третьей камеры дает уже незначительное уменьшение. Введение четвертой камеры значительно уменьша-

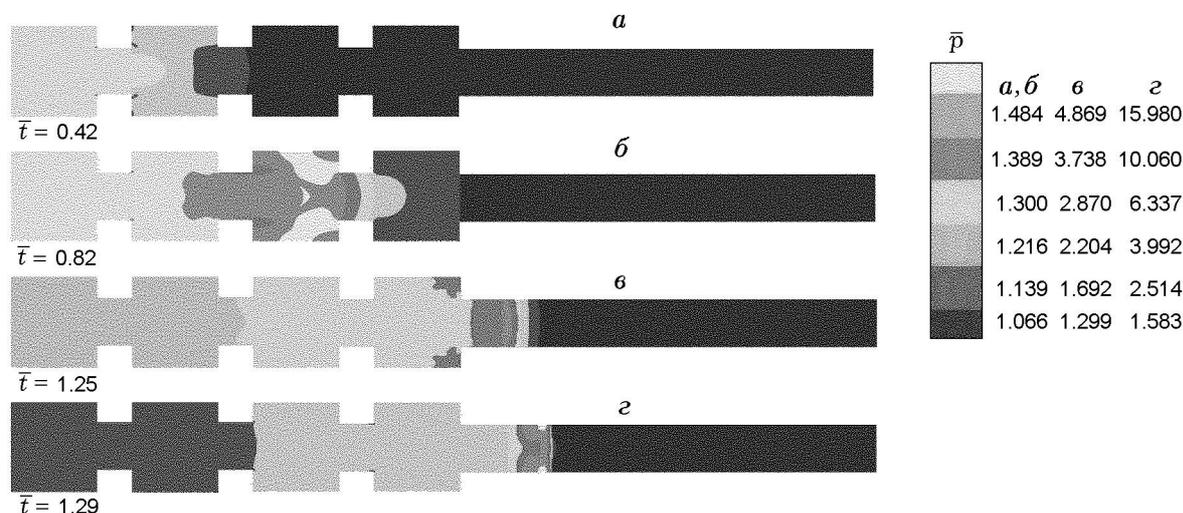


Рис. 5. Распределение давления в четырехкамерной трубе в различные моменты времени

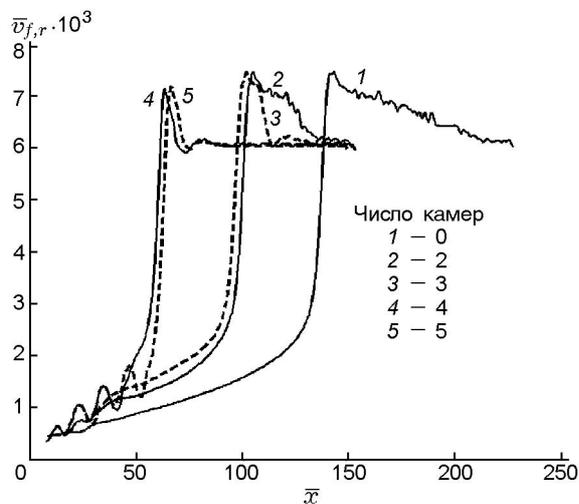


Рис. 6. Изменение скорости фронта реакции при переходе горения в детонацию в случае варьирования количества камер на начальном участке

ет преддетонационную длину и время. Наличие пятой камеры оказывает незначительное влияние. Войдя в пятую камеру, скорость фронта реакции уменьшается и только при выходе из этой камеры возникает переход горения в детонацию.

Теоретическое объяснение опирается на выполнение необходимого условия ПГД, а именно так называемого условия «сцепления» газодинамических процессов (генерация и распространение волн сжатия в несгоревшем газе) и физико-химических и других процессов, определяющих распространение фронта горения [12, 16, 38, 39]. Таковым является условие превышения скоростью волны воспламенения скорости звука в невозмущенном газе, по которому распространяется комплекс, включающий волну горения и генерируемые перед ней волны сжатия. Анализ результатов расчетов показывает, что поршневой эффект расширяющихся продуктов сгорания в форкамере приводит к резкому ускорению пламени при выходе в более узкую трубу. При вхождении во вторую камеру скорость фронта пламени падает, но нарастающая турбулизация увеличивает ее при выходе из второй камеры. При выходе из четвертой камеры пламя проталкивается в трубу со скоростью уже значительно выше необходимого критерия. Поэтому дальнейшее увеличение количества камер нецелесообразно и ведет к увеличению длины преддетонационного участка и преддетонационного времени.

Данный результат получен для водородовоздушной горючей смеси при рассматриваемых геометрических характеристиках. При изменении значений определяющих параметров, возможно, оптимальным окажется другое количество камер. Так, исследования ПГД в трубах других характерных размеров и с другими горючими смесями показали, что оптимальная с точки зрения сокращения преддетонационных времен и расстояний конфигурация может содержать две камеры [40].

Влияние длины камеры и длины участка трубы, соединяющего камеры, на преддетонационную длину в четырехкамерной трубе

На рис. 7 приведены зависимости преддетонационной длины от длины камеры и от длины участка трубы, соединяющего камеры, а на

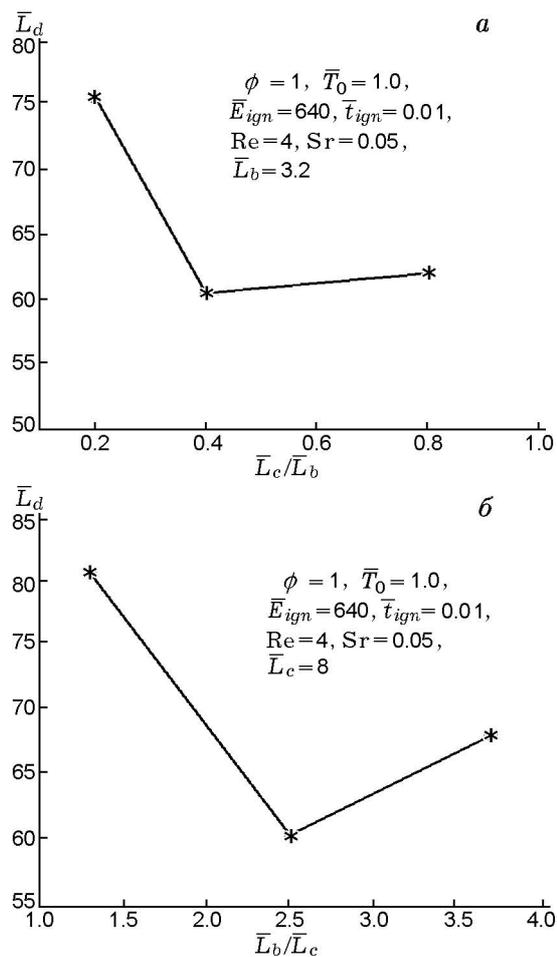


Рис. 7. Зависимость преддетонационной длины от длины камеры (а) и длины участка трубы (б), соединяющего камеры

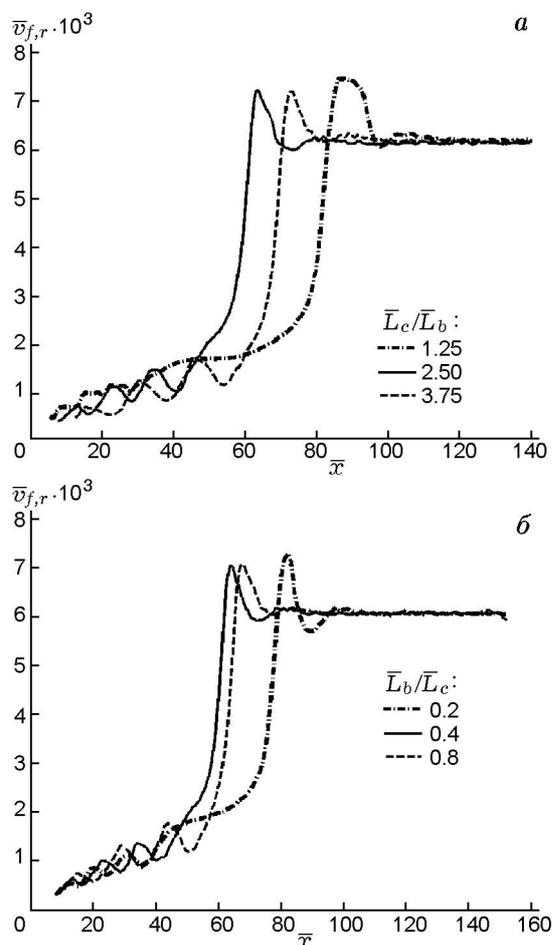


Рис. 8. Скорость фронта реакции вдоль трубы с различными по длине камерами (а) и участками трубы (б), соединяющими камеры

рис. 8 — соответствующие изменения скорости фронта реакции. Видно, что при уменьшении длины камеры осцилляции скорости фронта реакции на начальном участке, вызванные наличием камер, уменьшаются. Средняя скорость фронта реакции на начальном участке увеличивается. Преддетонационная длина \bar{L}_d немонотонно зависит от длины камер: при уменьшении длины камер она вначале уменьшается, а затем начинает возрастать. Следует отметить, что существует критическое соотношение длины камеры и соединяющего участка трубы, при котором преддетонационное расстояние \bar{L}_d минимально.

При увеличении длины соединяющего участка трубы скорость фронта реакции на выходе из последней камеры уменьшается, что вызывает увеличение преддетонационного времени. При этом преддетонационная длина из-

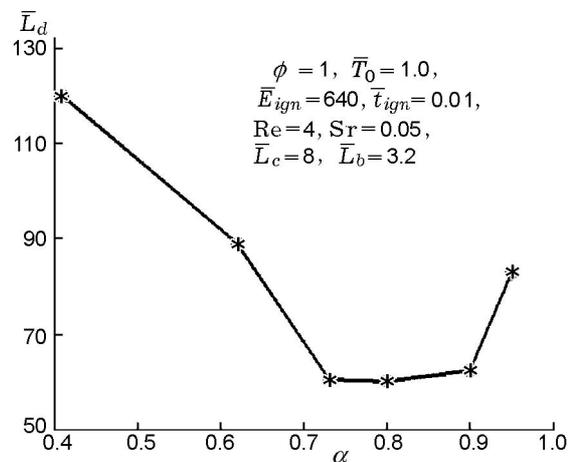


Рис. 9. Зависимость преддетонационной длины от параметра расширения в четырехкамерной трубе

меняется незначительно.

Влияние соотношения размеров поперечных сечений на преддетонационную длину в четырехкамерной трубе

Введем параметр расширения: $\alpha = \frac{S_c - S_t}{S_c}$, где S_c — площадь поперечного сечения камеры, S_t — площадь поперечного сечения трубы. Для исследования влияния параметра расширения на преддетонационную длину и время были проведены расчеты при разных значениях параметра расширения. Результаты расчетов для четырехкамерной трубы представлены на рис. 9. Видно, что параметр расширения значительно влияет на преддетонационную длину, хотя в диапазоне $0.7 < \alpha < 0.9$ она изменяется мало.

Влияние условий зажигания и начальной температуры на преддетонационную длину в четырехкамерной трубе

Рис. 10 иллюстрирует влияние условий зажигания на преддетонационную длину при различных начальных температурах. Из рисунка видно, что при малом времени зажигания (большая скорость выделения энергии) и небольшой начальной температуре ($\bar{T}_0 = 1.0$) увеличение энергии зажигания сначала значительно уменьшает преддетонационную длину, но в дальнейшем слабо влияет на нее. Если начальная температура ($\bar{T}_0 = 1.3$) относительно

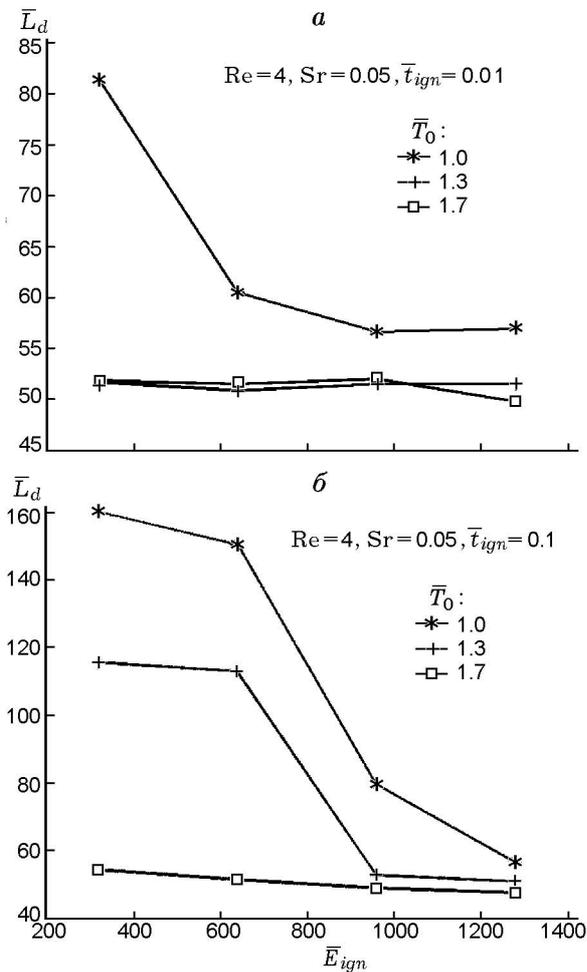


Рис. 10. Зависимость преддетонационной длины от параметров зажигания в случае малого (а) и длительного (б) времени выделения энергии при различных начальных температурах в четырехкамерной трубе

высока, то даже при малой энергии зажигания ($\bar{E}_{ign} = 320$) переход горения в детонацию происходит на минимальном расстоянии. Поэтому увеличение энергии зажигания и дальнейшее увеличение начальной температуры не влияют на преддетонационную длину.

Если время зажигания большое (невысокая скорость выделения энергии), то при малой начальной температуре ($\bar{T}_0 = 1.0$) увеличение энергии зажигания до среднего значения ($\bar{E}_{ign} = 640$) незначительно уменьшает преддетонационную длину, т. е. скорость выделения энергии недостаточно большая. Поэтому рост энергии зажигания уменьшает преддетонационную длину. При относительно большой начальной температуре ($\bar{T}_0 = 1.3$) ситу-

ация похожа на ситуацию при малой начальной температуре с той лишь разницей, что увеличение энергии зажигания выше значения $\bar{E}_{ign} = 960$ не влияет на преддетонационную длину. При еще большей начальной температуре ($\bar{T}_0 = 1.7$) даже при малой энергии зажигания ($\bar{E}_{ign} = 320$) переход горения в детонацию происходит на минимальном расстоянии. Поэтому увеличение энергии зажигания не влияет на преддетонационную длину.

Условия зажигания и начальная температура подобным же образом влияют на преддетонационное время. Разница лишь в том, что при малом времени зажигания увеличение начальной температуры от $\bar{T}_0 = 1.3$ до $\bar{T}_0 = 1.7$ вызывает уменьшение преддетонационного времени.

На рис. 11 приведена зависимость преддетонационной длины от начальной температуры для водородовоздушной стехиометрической смеси в случае гладкой трубы и четырехкамерной трубы. Расчеты проводились при малой энергии зажигания ($\bar{E}_{ign} = 320$) и $x_{ref} = L_{ref} = 0.005$ м. Из расчетов видно, что в гладкой трубе преддетонационное расстояние возрастает при увеличении начальной температуры смеси, а в трубе с форкамерами — сокращается. Для сравнения на рис. 11 приведены данные экспериментов [41, 42] по переходу горения в детонацию в гладких трубах.

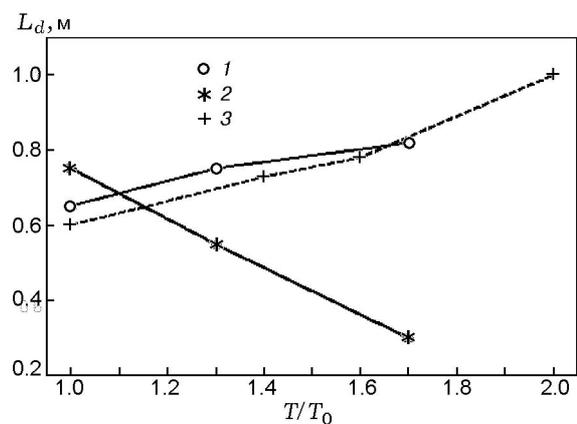


Рис. 11. Зависимость преддетонационной длины от начальной температуры для водородовоздушной стехиометрической смеси:

1 — гладкая труба, 2 — четырехкамерная труба, 3 — данные экспериментов [41, 42] в гладких трубах

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты исследований показали, что в процессе перехода горения в детонацию в водородовоздушной смеси наличие нескольких турбулизующих камер с широким поперечным сечением в области зажигания сокращает преддетонационное расстояние и стабилизирует переход к детонации. Увеличение числа камер турбулизаторов, расположенных в начальной секции трубы, способствует ПГД, пока скорость турбулентного пламени при выходе из последней не превышает скорость звука. Дальнейшее увеличение числа камер не способствует ПГД и даже препятствует ему в случае большего значения коэффициента расширения сечения. Оптимальное количество камер, минимизирующее преддетонационное расстояние, зависит от геометрических характеристик установки и физико-химических параметров горючей смеси. Сокращение длины камер и увеличение длины соединительных участков трубы приводят к увеличению преддетонационных расстояния и времени.

Зависимость преддетонационных длины и времени от параметра расширения в четырехкамерной трубе имеет характерный минимум в диапазоне значений параметра расширения $0.7 \div 0.9$.

Повышение начальной температуры смеси в зависимости от энергии зажигания и геометрических характеристик может приводить как к сокращению преддетонационных расстояния и времени, так и к их увеличению.

В целом на переход горения в детонацию влияют следующие факторы: начальная температура, скорость выделения энергии зажигания, геометрия начального участка канала. Комбинация значений указанных параметров позволяет минимизировать преддетонационную длину.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бишимов Е., Коробейников В. П., Левин В. А., Черный Г. Г. Одномерные нестационарные течения горючей смеси с учетом конечной скорости химических реакций // Изв. АН СССР. МЖГ. 1968. № 6. С. 7–19.
2. Черный Г. Г. Сверхзвуковое обтекание тел с образованием фронтов детонации и горения // Проблемы гидродинамики и механики сплошной среды. М.: Наука, 1969. С. 561–578.
3. Ларин О. Б., Левин В. А. Исследование ослабления волны детонации с двухфронтной структурой // Изв. АН СССР. МЖГ. № 3. 1971. С. 59–65.
4. Левин В. А., Марков В. В. Возникновение детонации при концентрированном подводе энергии // Физика горения и взрыва. 1975. Т. 11, № 4. С. 623–633.
5. Левин В. А., Марков В. В., Осинкин С. Ф. Прямое инициирование детонации в водородокислородной смеси, разбавленной азотом // Изв. АН СССР. МЖГ. № 6. 1992. С. 151.
6. Oppenheim A. K., Urtiew P. A. Experimental observations of the transition to detonation in an explosive gas // Proc. Roy. Soc. Sec. A. 1966. V. 295. P. 13.
7. Саламандра Г. Д. О взаимодействии пламени с ударной волной // Физическая гидродинамика. М.: Изд-во АН СССР, 1959. С. 163–167.
8. Bazhenova T. V., Soloukhin R. I. Gas ignition behind the shock waves // Intern. VII Symp. on Combustion. London: Butterworths, 1959.
9. Солоухин Р. И. Методы измерений и основные результаты в ударных трубах. Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т, 1969.
10. Смирнов Н. Н., Бойченко А. П. Переход горения в детонацию в бензиново-воздушных смесях // Физика горения и взрыва. Т. 22, № 2. С. 65–67.
11. Smirnov N. N., Tyurnikov M. V. Experimental investigation of deflagration to detonation transition hydrocarbon-air gaseous mixtures // Combust. Flame. 1995. V. 100. P. 661–668.
12. Зельдович Я. Б., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М., Сивашинский Г. И. О переходе к детонации в неравномерно нагретом газе // Прикл. математика и техн. физика. 1970. № 2. С. 76.
13. Merzhanov A. G. On critical conditions for thermal explosion of a hot spot // Combust. Flame. 1966. N 10. P. 341–348.
14. Borisov A. A. On the origin of exothermic centers in gaseous mixtures // Acta Astronaut. 1974. N 1. P. 909–920.
15. Kailasanath K., Oran E.S. Ignition of flamelets behind incident shock waves and the transition to detonation // Combust. Sci. Technol. 1983. V. 34. P. 345–362.
16. Zeldovich Ya. B., Gelfand B. E., Tsyganov S. A., Frolov S. M., Polenov A. N. Concentration and temperature non-uniformities of combustible mixture as a reason of pressure waves generation // Dynamics of Explosions / A. Kuhl et al. (Eds). New York: AIAA Inc., 1988. V. 114. P. 99.
17. Смирнов Н. Н., Демьянов Ан. Ю., Панфилов И. И. Переход горения в детонацию // Химическая физика горения и взрыва: Детонация. М.: Изд-во АН СССР, 1989. С. 52–56.
18. Smirnov N. N., Panfilov I. I. Deflagration to detonation transition in combustible gas mixtures // Combust. Flame. 1995. V. 101. P. 91–100.

19. **Фролов С. М.** Влияние неидеальности на развитие и распространение взрыва. Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. М.: ИХФ, 1992.
20. **Smirnov N. N., Nikitin V. F., Boichenko A. P., Tyurnikov M. V., Baskakov V. V.** Deflagration to detonation transition in gases and its application to pulse detonation devices // *Gaseous and Heterogeneous Detonations: Science to Applications* / G. D. Roy et al. (Eds). Moscow: ENAS Publ., 1999. P. 65–94.
21. **Гостинцев Ю. А., Истратов А. Г., Кидин Н. И., Фортов В. Е.** Структура сферических турбулентных пламен // *Теплофизика высоких температур*. 1999. Т. 37, № 2. С. 306–312.
22. **Гостинцев Ю. А., Истратов А. Г., Фортов В. Е.** О фрактальной структуре турбулентных сферических пламен // *Докл. АН*. 1997. Т. 353, № 1. С. 55–57.
23. **Адушкин В. В., Фортов В. Е., Гостинцев Ю. А., Истратов А. Г., Карпов В. П., Кидин Н. И., Федоров А. В., Шацких Ю. В.** Развитие неустойчивости сферических газовых пламен и возникновение детонации // *Тр. XIII симпозиума по горению и взрыву*, Черноголовка, 7–11 февр. 2005. CD.
24. **Clarke J. F., Kassoy D. R., Riley N.** On direct initiation of a plane detonation wave // *Proc. Roy. Soc. London. Ser. A*. 1986. V. 408. P. 129–148.
25. **Brown C. J., Thomas G. O.** Experimental studies of shock-induced ignition and transition to detonation in ethylene and propane mixtures // *Combust. Flame*. 1999. V. 117. P. 861–870.
26. **Khohlov A. M., Oran E. S.** Numerical simulation of detonation initiation in a flame brush: the role of hot spots // *Combust. Flame*. 1999. V. 119. P. 400–416.
27. **Щелкин К. И., Трошин Я. К.** Газодинамика горения. М.: Изд-во АН СССР, 1963.
28. **Knystautas R., Lee J. H. S., Sheperd J. E., Teodorczyk A.** Flame acceleration and transition to detonation in benzene-air mixtures // *Combust. Flame*. 1998. V. 115. P. 424–436.
29. **Абдуллин Р. Х., Бабкин В. С., Борисенко А. В., Сеначин П. К.** Горение газа в линейных системах сообщающихся сосудов. Барнаул, 1997. С. 3–55. (Препринт Алт. ГТУ).
30. **Азатян В. В.** Роль цепного механизма в воспламенении и горении водорода с кислородом в области третьего предела // *Кинетика и катализ*. 1996. Т. 37, № 4. С. 512–520.
31. **Smirnov N. N., Nikitin V. F.** The influence of confinement geometry on deflagration to detonation transition in gases // *J. Phys. IV. France*. 2002. V. 12, Pr. 7. P. 341–351.
32. **Smirnov N. N., Nikitin V. F., Tyurnikov M. V., Boichenko A. P., Legros J. C., Shevtsova V. M.** Control of detonation onset in combustible gases // *High Speed Deflagration and Detonation* / G. D. Roy et al. (Eds). Moscow: Elex-KM Publ., 2001. P. 3–30.
33. **Hamming R. W.** Numerical methods for scientists and engineers. New York: McGraw-Hill Co Inc., 1962.
34. **Philip M.** Experimentelle und theoretische Untersuchungen zum Stabilitätsverhalten von Drallflammen mit zentraler Rückstromzone: Dissertation. Karlsruhe University, 1991.
35. **Starik A. M., Titova N. S.** Initiation of detonation in a supersonic flow behind a shock wave under non-equilibrium excitation of vibrational degrees of freedom of molecules // *Gaseous and Heterogeneous Detonations* / G. D. Roy et al. (Eds). Moscow: ENAS Publ., 1999. P. 225–240.
36. **Schultz E., Wintenberger E., Shepherd J.** Investigation of deflagration to detonation transition for application to pulse detonation engine ignition systems // *16th JANNAP Propulsion Meeting*, 1999.
37. **Card J., Rival D., Ciccarelli G., Murray S., Zhang F.** DDT in fuel-air mixtures at elevated temperatures and pressures // *18th Intern. Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive System*, Seattle, USA, 2001.
38. **Cheng R. K., Short J. M.** Diagnostics of the exothermic process // *Progr. Astronaut. Aeronaut.* N.-Y.: AIAA Inc., 1977. V. 53. P. 611.
39. **Dold J. W., Short M.** Compressibility corrections to Zeldovich's spontaneous flame and the onset of an explosion in a non-uniformly pre-heated medium // *Proc. 13th ICDERS*, Nagoya. 1991. P. 63.
40. **Смирнов Н. Н., Никитин В. Ф.** Влияние геометрии канала и температуры смеси на переход горения в детонацию в газах // *Физика горения и взрыва*. 2004. Т. 40, № 2. С. 68–83.
41. **Powell D., Van Tiggelen P. J., Vasatko H., Wagner H. G.** Initiation of detonation in various gas mixtures // *Combust. Flame*. 1970. V. 15. P. 173–177.
42. **Oppenheim A. K., Stern R. A.** On the development of gaseous detonation. Analysis of wave phenomena // *Seventh Symp. (Intern.) on Combust.* London: Butterworths, 1959. P. 837–850.

*Поступила в редакцию 28/VI 2007 г.,
в окончательном варианте — 5/III 2008 г.*