

ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ УДАРНЫХ ВОЛН В ПРОСТРАНСТВЕННО НЕОДНОРОДНОЙ САМОВОСПЛАМЕНЯЮЩЕЙСЯ СРЕДЕ ДЛЯ АРРЕНИУСОВОЙ КИНЕТИКИ РЕАКЦИИ ГОРЕНИЯ

И. А. Заев, И. А. Кириллов

РНЦ «Курчатовский институт», 123182 Москва, i_zaev@mail.ru

В предыдущей работе был развит подход к описанию формирования и распространения малых газодинамических возмущений в пространственно неоднородной самовоспламеняющейся среде для произвольной кинетики химических реакций. В настоящей работе для иллюстрации предложенного подхода проведено исследование задачи на примере простой реакции, скорость которой определяется законом Аррениуса. Сравнение результатов расчетов с решением полной системы уравнений газовой динамики показало, что развитый подход обеспечивает хорошую точность количественных оценок.

Ключевые слова: детонация, мягкое инициирование, волна спонтанного воспламенения, химическая кинетика.

ВВЕДЕНИЕ

В работе авторов [1] была предложена теоретическая модель и выведено уравнение, описывающее образование и эволюцию газодинамических возмущений в пространственно неоднородной воспламеняющейся среде. Принималось, что основная нелинейность связана с газодинамическими эффектами (образование ударных волн), а вклад возмущений в скорость химических реакций линеен.

В отличие от предшествующих работ в развиваемом подходе не накладываются ограничения на тип кинетики химических реакций и величину безразмерной энергии активации. Это было достигнуто за счет выбора в качестве базового (не возмущенного газодинамической) решения спонтанного пламени Зельдовича [2], возмущения относительно которого и являются предметом данного исследования.

В настоящей работе предложенный подход применен к решению задачи о формировании ударной волны в начально-покоящейся пространственно неоднородной среде с химической реакцией, скорость которой зависит от температуры по закону Аррениуса. Решение полной системы уравнений газовой динамики с той же моделью химической кинетики показало, что развиваемый подход может быть использован для количественных оценок.

ВОЗМУЩЕНИЯ В ПРОСТРАНСТВЕННО НЕОДНОРОДНОЙ САМОВОСПЛАМЕНЯЮЩЕЙСЯ СРЕДЕ

В газовой среде с температурой T_a создано локальное начальное возмущение температуры $T_{ini}(x)$ — «горячее пятно» размером $2L$. Температура в центре горячего пятна T_m . Начальное давление p_{ini} одинаково во всех точках среды. Далее принимается, что система имеет центральную симметрию относительно самой горячей точки ($x = 0$) и распределение температуры в горячем пятне линейно.

При протекании экзотермической реакции в среде образуются газодинамические возмущения. Как показано в работе [1], эволюцию возмущений и точку в пространстве, где формируется ударная волна, можно определить в результате решения следующей системы уравнений:

$$\begin{aligned} \left(\frac{dx}{dt}\right)_\sigma &= c_0(x, t), \quad x(t = t_0, \sigma) = x_0; \\ \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t}\right)_\sigma &= \frac{\gamma + 1}{2} \varphi^2 + \\ &+ \frac{1}{2} \varphi \left(\frac{\partial HR}{\partial p} + \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial HR}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho_0 c_0} \left(\frac{\partial(\rho_0 c_0)}{\partial t} \right)_\sigma \right) + \\ &+ \frac{(c_0 p_0 \xi) \xi}{2 \rho_0 c_0}, \quad \varphi(t = t_0, \sigma) = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь x — пространственная координата, t — время, φ — градиент скорости, ξ — параметр, определяющий линию, вдоль которой распространяются звуковые возмущения, σ — параметр, определяющий характеристику уравнений газовой динамики, p — давление, HR — скорость тепловыделения, c — скорость звука, ρ — плотность, γ — показатель адиабаты. Индексом 0 отмечены величины, соответствующие спонтанному пламени Зельдовича [2], которые являются функциями времени и координаты и определяются из уравнений спонтанного пламени.

Решение поставленной задачи — исследование образования и распространения газодинамических возмущений при самовоспламенении пространственно неоднородной среды и формирования ударных волн — является наиболее простым, если известно аналитическое решение уравнений спонтанного пламени (т. е. все функции с индексом 0 в системе уравнений (1)). В данной работе поставленная задача решается на примере одностадийной реакции, для которой такое аналитическое решение было найдено Годесом [3].

ОДНОСТАДИЙНАЯ АРРЕНИУСОВА КИНЕТИКА РЕАКЦИИ ГОРЕНИЯ

Модель химической кинетики, временные характеристики

Исторически первой и наиболее распространенной в теоретических исследованиях горения и детонации [4–11] является модель простой (одностадийной) реакции, скорость которой зависит от температуры по закону Аррениуса.

В качестве примера рассмотрим реакцию первого порядка $F \rightarrow P$. Уравнение химической кинетики и закон сохранения энергии при адиабатическом сгорании записываются в виде

$$\frac{dy}{dt} = k(T)(1 - y), \quad \frac{dT}{dt} = Qk(T)\frac{1 - y}{c_v}, \quad (2)$$

где y — массовая доля продукта P , меняющаяся от 0 (начальное состояние) до 1 (конечное состояние), Q и c_v — удельные теплота реакции и теплоемкость среды. По закону Аррениуса

$$k = k_0 \exp(-E_a/RT),$$

где k_0 — предэкспонент, E_a — энергия активации, R — универсальная газовая постоянная. Начальные условия для системы (2):

$$T(0) = T_{ini}, \quad y(0) = 0.$$

Для реакции первого порядка аналитическое решение Годеса [3] имеет вид

$$t(y) = \frac{1}{k_0} \left[\text{Ei} \left(\frac{\tilde{\varepsilon}}{1 + y\beta} \right) - \text{Ei}(\tilde{\varepsilon}) - \exp \left(\frac{\tilde{\varepsilon}}{1 + \beta} \right) \left(\text{Ei} \left(\frac{\tilde{\varepsilon}\beta(1 - y)}{(1 + y\beta)(1 + \beta)} \right) - \text{Ei} \left(\frac{\tilde{\varepsilon}\beta}{1 + \beta} \right) \right) \right],$$

где $\tilde{\varepsilon} = E_a/RT_{ini}$, $\beta = Q/(c_v T_{ini})$, $\text{Ei}(x)$ — интегральная экспонента. Так как

$$y = c_v(T - T_{ini})/Q,$$

то в безразмерных переменных

$$\tau = k_0 t, \quad \theta = \frac{T}{T_b} = \frac{T}{Q/c_v}, \quad T_b = \frac{Q}{c_v},$$

аналитическое решение переписывается следующим образом:

$$\tau(\theta) = \text{Ei} \left(\frac{\varepsilon_a}{\theta} \right) - \text{Ei} \left(\frac{\varepsilon_a}{\theta_{ini}} \right) - \exp \left(\frac{\varepsilon_a}{\theta_{ini} + 1} \right) \left\{ \text{Ei} \left(\frac{\varepsilon_a(1 + \theta_{ini} - \theta)}{\theta(1 + \theta_{ini})} \right) - \text{Ei} \left(\frac{\varepsilon_a}{\theta_{ini}(1 + \theta_{ini})} \right) \right\}, \quad (3)$$

$$\varepsilon_a = E_a/RT_b, \quad \theta_{ini} = T_{ini}/T_b.$$

Процесс самовоспламенения принято характеризовать временем индукции. Скорость тепловыделения $\frac{d\theta}{d\tau}$ максимальна при

$$\theta_{hr, \max} = \left[(\varepsilon_a^2 + 4\varepsilon_a\theta_{ini} + 4\varepsilon_a)^{1/2} - \varepsilon_a \right] / 2. \quad (4)$$

Соответствующий момент времени принимается в качестве безразмерного времени индукции:

$$\tau_{ind, hr} = \tau(\theta_{hr, \max}). \quad (5)$$

Последний критерий получил широкое распространение при исследовании сложной кинетики химических реакций [12–14].

В работах по химической кинетике, например [13], эффективную энергию активации определяют в виде

$$E_{a,eff}(\theta_{ini}) = \frac{d \ln(\tau_{ind,hr}(\theta_{ini}))}{d(1/\theta_{ini})}.$$

Рассчитанное таким образом значение эффективной энергии для простой реакции первого порядка (1) отличается от истинной энергии активации этой же реакции. Например, при $E_a = 2.27$ и начальной температуре $\theta_{ini} = 0.2 \div 0.5$ функция $E_{a,eff}(\theta_{ini})$ является монотонной и отношение $E_{a,eff}(\theta_{ini})/\varepsilon_a$ меняется в диапазоне

$$0.61 < E_{a,eff}(\theta_{ini})/\varepsilon_a < 0.79.$$

При переходе к безразмерным переменным в уравнениях (1) в качестве масштабов выбираются: $T_b = Q/c_v$ — масштаб температуры, p_{ini} — масштаб давления, $1/k_0$ — масштаб времени, $c_b = (\gamma RT_b/M)^{1/2}$ — масштаб скорости, c_b/k_0 — масштаб длины.

Закономерности формирования ударных волн в пространственно неоднородной самовоспламеняющейся среде

Параметрический анализ. Рассмотрим закономерности формирования ударных волн в пространственно неоднородной самовоспламеняющейся среде в отсутствие начальных газодинамических возмущений.

В безразмерных переменных система уравнений (1) записывается в виде:

$$\begin{aligned} \left(\frac{dX}{d\tau}\right)_\sigma &= C_0(X, \tau), \quad X(\tau = \tau_0, \sigma) = X_0; \\ \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \tau}\right)_\sigma &= \frac{\gamma + 1}{2} \Phi^2 + \\ &+ \frac{1}{2} \Phi \left(\frac{\partial \Psi}{\partial P} + \frac{1}{C_0^2} \frac{\partial \Psi}{\partial R} - \frac{1}{R_0 C_0} \left(\frac{\partial (R_0 C_0)}{\partial \tau} \right)_\sigma \right) + \\ &+ \frac{(C_0 P_0 \Xi) \Xi}{2 R_0 C_0}, \quad \Phi(\tau = \tau_0, \sigma) = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь безразмерные переменные: τ — время, X — пространственная координата, C_0 — скорость звука, θ — температура, Φ — градиент скорости, Ξ — параметр, определяющий линию, вдоль которой распространяются звуковые возмущения, P — давление, R_0 — плотность, Ψ — безразмерная скорость тепловыделения — определяются следующими соотношениями:

$$\tau = k_0 t, \quad X = x \frac{k_0}{c_b}, \quad C_0 = \frac{c_0}{c_b},$$

$$c_b = \left(\frac{\gamma RT_b}{M} \right)^{1/2}, \quad \theta = \frac{T}{T_b}, \quad \Phi = \frac{\varphi}{k_0}, \quad \Xi = \xi \frac{k_0}{c_b},$$

$$P = \frac{p}{p_{ini}}, \quad R_0 = \frac{\rho_0 RT_b}{p_{ini} M}, \quad \Psi = \frac{HR}{p_{ini} k_0},$$

где M — молекулярная масса реагирующей смеси.

В безразмерных переменных начальное распределение температуры задается формулой

$$\theta_{ini}(X) = \begin{cases} \theta_m - gX, & 0 \leq X \leq \Lambda, \\ \theta_a, & \Lambda < X, \end{cases}$$

где $\theta_m = T_m/T_b$ — температура в центре горячего пятна, $\theta_a = T_a/T_b$ — температура окружающей среды, $\Lambda = L \cdot k_0/c_b$ — полуширина горячего пятна, $g = Gc_b/T_b k_0$ — градиент температуры, G — градиент температуры в горячем пятне, К/м.

Траекторией спонтанного пламени является линия $\tau_{ind,hr}(X)$, определяемая только начальными условиями. Дополнительно на X - τ -диаграмме рассматриваются траектории, задаваемые уравнениями $\tau_{ind1}(X)$ (линия, на которой температура увеличивается на один характерный интервал $\theta_{ini}^2/\varepsilon_a$) и $\tau_r(X)$ (время окончания реакции, когда температура достигает значения $\theta_{ini} + 0.99$), которые выделяют область, где проходит интенсивная химическая реакция.

Среди характеристик уравнений газодинамики выделяется та, на которой формируется ударная волна (математически: решение Φ системы уравнений (6) обращается в бесконечность). Данная характеристика определяется начальной точкой (X_{0cr}, τ_{0cr}) , при этом ударная волна формируется в точке (X_{cr}, τ_{cr}) .

В используемой системе безразмерных величин имеется три параметра: энергия активации ε_a , начальный градиент температуры g , температура в центре горячего пятна θ_m .

На рис. 1, 2 приведены результаты параметрических расчетов — зависимости $X_{0cr}(g, \varepsilon_a, \theta_m)$, $X_{cr}(g, \varepsilon_a, \theta_m)$, $\theta_{ini}(X_{0cr}, \tau_{0cr})$ (дискретные точки, соединенные сплошной и штриховой линиями).

При малых начальных градиентах температуры характеристика, на которой формируется ударная волна, выходит из точки

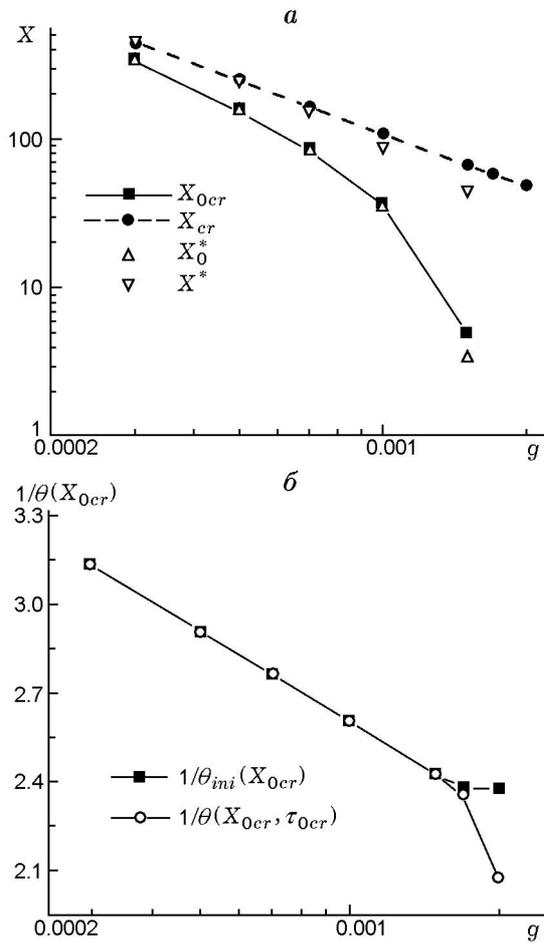


Рис. 1. Начальная (X_{0cr}) и конечная (X_{cr}) точки характеристики, на которой формируется ударная волна, при изменении начального градиента температуры (а) и обратная температура в начальной точке X_{0cr} (б):

$$\varepsilon_a = 2.27, \theta_m = 0.42, \theta_a = 0.2$$

$X_{0cr}(g) > 0, \tau_{0cr} = 0$ и проходит расстояние $X_{cr} - X_{0cr}$ до формирования ударной волны. При этом зависимость $X_{cr}(g)$ носит степенной характер: прямая линия в логарифмическом масштабе на рис. 1, а при фиксированных параметрах $\varepsilon_a = 2.27, \theta_m = 0.42, \theta_a = 0.2$ и показателе адиабаты $\gamma = 1.4$.

При увеличении начального градиента температуры точка X_{0cr} по закону, отличному от степенного (см. рис. 1, а), смещается к центру горячего пятна и начиная со значения $g \approx 0.0017$ (при $\varepsilon_a = 2.27$) совпадает с ним:

$$X_{0cr} = 0, \tau_{0cr} \geq 0.$$

При $\tau_{0cr} > 0$ начальное условие для уравнения Рикатти в системе (6) необходимо моди-

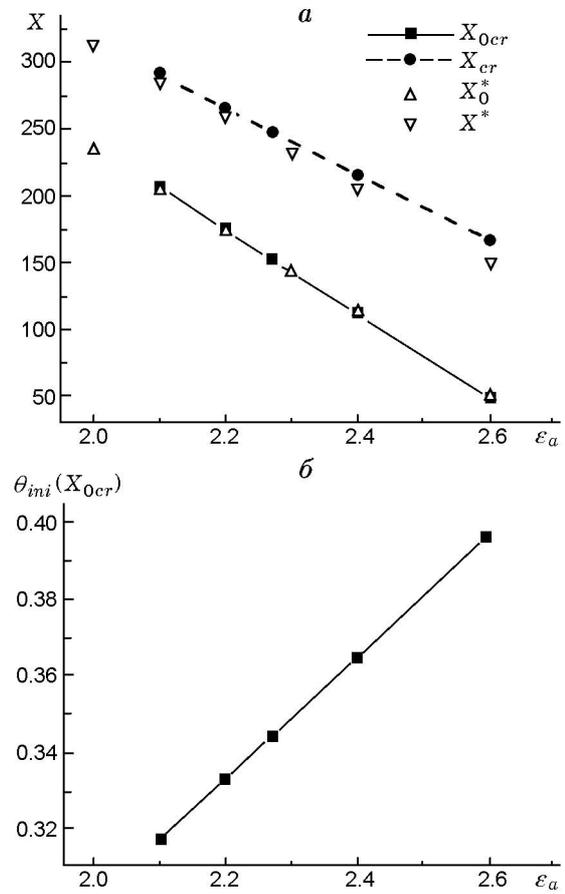


Рис. 2. Начальная (X_{0cr}) и конечная (X_{cr}) точки характеристики, на которой формируется ударная волна, при изменении энергии активации (а) и температура в начальной точке X_{0cr} (б):

$$g = 0.0005, \theta_m = 0.42, \theta_a = 0.2$$

фицировать с учетом волны разрежения, появляющейся при расширении газа у стенки или в центре симметрии, где скорость газа должна оставаться нулевой. Для представленных на рис. 1 зависимостей такой модификации сделано не было. Тем не менее приведенные результаты для случая больших начальных градиентов температуры ($X_{0cr} = 0, \tau_{0cr} \geq 0$) показывают, что ударная волна формируется на характеристике, выходящей из центра горячего пятна, что является важным результатом для понимания качественных и количественных особенностей формирования ударных волн в пространственно неоднородной воспламеняющейся среде.

Приведенные на рис. 1 результаты расчетов показывают, что при высоких темпера-

турах в центре горячего пятна θ_m характеристика, на которой формируется ударная волна, выходит из точки, отстоящей от центра на некоторое расстояние. Значит, непосредственное влияние на формирование газодинамических возмущений и ударной волны температура θ_m не оказывает. При изменении θ_m начальная точка характеристики X_{0cr} смещается относительно центра горячего пятна так, что температура в этой точке $\theta_{0cr}(g, \varepsilon_a) = \theta_{ini}(X_{0cr})$ и величина $X_{cr} - X_{0cr}$ остаются постоянными. При этом $\theta_m > \theta_{0cr}(g, \varepsilon_a)$. Следовательно, ту часть горячего пятна, где начальная температура больше, чем $\theta_{0cr}(g, \varepsilon_a)$, можно не рассматривать при исследовании формирования ударных волн в пространственно неоднородной воспламеняющейся среде.

Результаты параметрического анализа при варьировании энергии активации ε_a приведены на рис. 2. Во всех расчетах были фиксированы следующие параметры: $g = 0.0005$, $\theta_m = 0.42$, $\theta_a = 0.2$, $\gamma = 1.4$. Приведенные на рис. 2, *a* зависимости $X_{0cr}(\varepsilon_a)$, $X_{cr}(\varepsilon_a)$ с хорошей степенью точности описываются линейными функциями, как и зависимость $\theta_{ini}(X_{0cr})$ на рис. 2, *b* (так как $X_{0cr} = [\theta_m - \theta_{ini}(X_{0cr})]/g$). При этом угловой коэффициент прямой линии на рис. 2, *b* равен 0.158.

Как видим, только два из трех параметров определяют начальную и конечную точки характеристики, на которой формируется ударная волна, если начальные газодинамические возмущения отсутствуют: это начальный градиент температуры g и энергия активации ε_a . Следовательно, в среде с линейным распределением температуры существует область, ограниченная точками с координатами X_{0cr} и X_{cr} , которая определяет формирование ударной волны. Все, что находится вне этой области, на формирование ударной волны не влияет.

Интерпретация. Проведенная серия расчетов при изменяющихся в широком диапазоне параметрах позволила описать общую последовательность событий до момента формирования ударной волны.

Так, например, при $g = 0.0005$, $\varepsilon_a = 2.27$, $\theta_m = 0.42$, $\theta_a = 0.2$, $\gamma = 1.4$, выходя из точки $X_{0cr} = 152$, характеристика $X_0(\tau)$ пересекает передний фронт спонтанного пламени $\tau_{ind1}(\theta_{ini}(X))$, уменьшает свой наклон, так как температура среды на ее пути увеличивается, и достигает линии максимальной скорости

тепловыделения $\tau_{ind,hr}(\theta_{hr,max}(X))$, касаясь ее. В этот момент скорость спонтанного пламени, рассчитанная в соответствии с определением времени индукции (5), сравнивается с локальной скоростью звука. Дальше спонтанное пламя замедляется, а характеристика продолжает движение в область с уменьшающейся температурой, но формирование ударной волны происходит на характеристике сразу после касания с линией максимального тепловыделения. Описанную ситуацию иллюстрирует рис. 3, где приведены X - τ -диаграмма распространения волны самовоспламенения и траектория характеристики, на которой формируется ударная волна, а также показан вклад трех

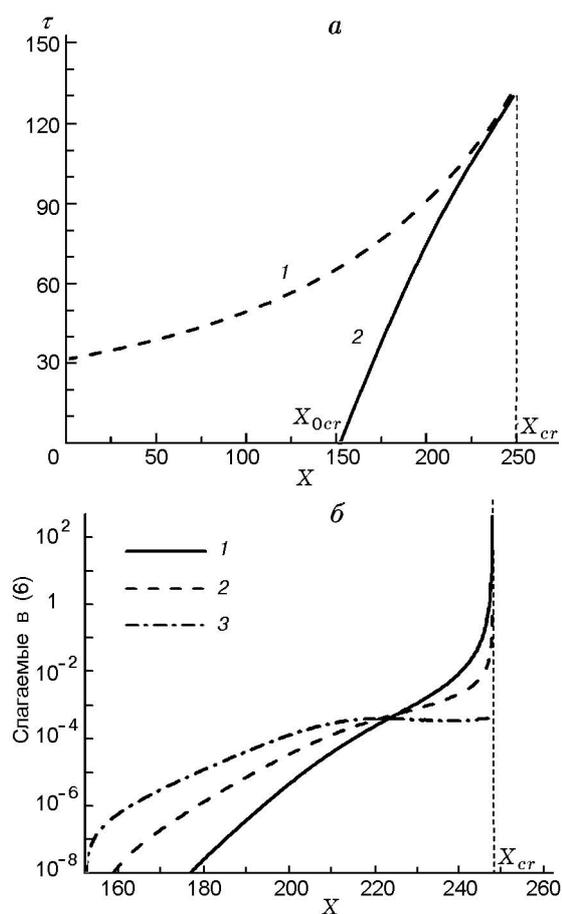


Рис. 3. X - τ -диаграмма спонтанного пламени (1) и характеристики (2), на которой формируется ударная волна (а). Вклад каждого члена из правой части уравнения (6) (б):

$\varepsilon_a = 2.27$, $g = 0.0005$, $\theta_m = 0.42$, $\theta_a = 0.2$; б: 1 — нелинейный (квадратичный) член, 2 — линейный член, 3 — свободный член, описывающий образование возмущений в зоне химической реакции

слагаемых из правой части уравнения Рикатти (6) вдоль траектории характеристики.

Если фиксировать энергию активации, то при увеличении начального градиента температуры характеристика смещается относительно линии максимальной скорости тепловыделения в область низких температур таким образом, что касается промежуточной линии, на которой $\frac{d\theta}{d\tau}$ больше нуля, но меньше максимальной скорости тепловыделения $\left(\frac{d\theta}{d\tau}\right)_{\max}$.

При этом последовательность, в которой действуют слагаемые из правой части уравнения Рикатти, не изменяется.

Интерпретация результатов параметрических расчетов, приведенных на рис. 1, 2, основывается на концепции скорости спонтанного пламени [2], которая в безразмерных переменных определяется соотношением

$$W_{sp,hr}(X) = 1 / \frac{d\tau_{ind,hr}(X)}{dX}, \quad (7)$$

где $\tau_{ind,hr}(X)$ — время индукции в точке с координатой X . Чем больше скорость спонтанного пламени, тем меньше наклон траектории $\tau_{ind,hr}(X)$ на X - τ -диаграмме.

Так как скорость спонтанного пламени определяется производной от времени индукции, которое зависит от начальной температуры по закону Аррениуса, то в случае заданного начального градиента температуры g формулу (7) удобно переписать в виде

$$W_{sp,hr}(X) = \frac{\theta_{ini}^2(X)}{g\varepsilon_{a,eff}\tau_0} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{a,eff}}{\theta_{ini}(X)}\right) \quad (8a)$$

или

$$W_{sp,hr}(\theta_{ini}) = \frac{\theta_{ini}^2}{g\varepsilon_{a,eff}\tau_0} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{a,eff}}{\theta_{ini}}\right), \quad (8б)$$

где τ_0 — константа. Уравнение (8б) более физично, так как время индукции является функцией температуры, а не координаты. Здесь $\varepsilon_{a,eff}$ — эффективная энергия активации для выбранного определения времени индукции.

Обобщением проведенной серии расчетов (см. рис. 1, 2) является следующий факт. В начальной точке X_{0cr} характеристики, на которой формируется ударная волна, скорость спонтанного пламени $W_{sp,hr}$ практически постоянна (не зависит от начального градиента температуры и энергии активации) и при $\gamma = 1.4$ равна

$$W_{sp,hr,cr} \approx 2.5. \quad (9)$$

Точные значения скорости спонтанного пламени в широком диапазоне изменения параметров g и ε_a приведены в табл. 1, их разброс не превосходит 5 %.

Численное значение скорости Чепмена — Жуге в интервале начальных температур $\theta_{ini} = 0.3 \div 0.5$ меняется от 2.00 до 2.09. Видим, что значение скорости из уравнения (9) превосходит скорость Чепмена — Жуге на 25 %.

Условие (9) и уравнение (8б) определяют зависимость величин θ_{0cr} и X_{0cr} от начального градиента температуры и энергии активации.

Из (8б) следует, что при определении роли начального градиента температуры естественными являются аррениусовы координаты $(\ln g, 1/\theta_{0cr})$, в которых имеем практически прямую линию (см. рис. 1, б) с наклоном -2.274 (линейная аппроксимация методом наименьших квадратов). Исходя из уравнения (8б) наклон той же кривой должен быть

$$-\varepsilon_{a,eff} - 2\theta_{0cr} \approx -2.25,$$

и предсказанное значение -2.25 находится в хорошем согласии с рассчитанным.

Аналогично можно показать, что зависимость θ_{0cr} от энергии активации с хорошей точностью линейна. Действительно, условие (9) и уравнение (8б) определяют θ_{0cr} как функцию ε_a . Если ввести обозначение $\nu = \varepsilon_{a,eff}/\theta_{0cr}$, то при фиксированном начальном градиенте температуры

$$\exp(-\nu)/\nu^2 = 2.5g/\varepsilon_{a,eff}.$$

Решение уравнения слабо зависит от изменения величины $\varepsilon_{a,eff}$, и, например, при $g =$

Таблица 1

Скорость спонтанного пламени в начальной точке характеристики, на которой формируется ударная волна

ε_a	g	$W_{sp,hr}$
2.27	0.0015	2.422
2.27	0.0005	2.502
2.27	0.0003	2.528
2.1	0.0005	2.454
2.4	0.0005	2.527
2.6	0.0005	2.557

0.0005 и $\varepsilon_{a,eff} = 1.407$ будем иметь $\nu = 3.867$, т. е.

$$\theta_{0cr} = \frac{\varepsilon_{a,eff}}{3.867} = \frac{\varepsilon_{a,eff}}{\varepsilon_a} \frac{\varepsilon_a}{3.867} \approx 0.16\varepsilon_a$$

в выбранном диапазоне энергии активации. Предсказанное значение углового коэффициента хорошо согласуется со значением, полученным методом наименьших квадратов на основе расчетов (см. рис. 2). Как следствие, зависимость $X_{0cr}(\varepsilon_a)$ линейна.

Интерпретация результатов расчетов (см. рис. 1–3) на основе понятия скорости спонтанного пламени позволяет не только устанавливать вид интересующих зависимостей на качественном уровне, но и выполнить количественные оценки. Так, решение X_0^* уравнения

$$W_{sp,hr}(X_0^*) = 2.5 \quad (10)$$

является оценкой для X_{0cr} . В уравнении (10) использование аппроксимации (8а), (8б) с эффективной энергией активации не обязательно.

Как показал анализ X – τ -диаграмм, в большом диапазоне параметров характеристика, на которой формируется ударная волна, касается (проходит близко) траектории спонтанного пламени $\tau_{ind,hr}(X)$, а точка формирования ударной волны X_{cr} находится вблизи точки касания. Данное утверждение справедливо не во всем исследованном диапазоне параметров (см. описание рис. 3). Тем не менее оценкой для X_{cr} может служить решение X^* уравнения

$$W_{sp,hr}(X^*) = (\theta_{hr,max}(X^*))^{1/2}, \quad (11)$$

которое является условием касания траектории спонтанного пламени и характеристики. На рис. 1,а и 2,а оценки, полученные с помощью уравнений (10) и (11), представлены в виде дискретных точек. Как видим, уравнение (10) «точно» во всем диапазоне параметров, а применение уравнения (11) ограничено.

Сравнение с решением полной системы уравнений газовой динамики

Для оценки точности результатов, полученных на основе предлагаемого подхода, было проведено сравнение результатов решения системы уравнений (6) с решением полной системы уравнений газовой динамики для простой реакции первого порядка с аррениусовой зависимостью скорости от температуры.

Таблица 2

Сравнение координат и моментов времени формирования ударной волны

ε_a	g	Система (6)		CFD++	
		X_{cr}	τ_{cr}	X_{cr}	τ_{cr}
2.27	0.001	107.84	94.09	108.93	101.22
2.27	0.0005	248	130.1	243.75	139.65
2.2	0.0005	265.5	125.47	266.96	135.77
2.4	0.0005	215.85	138.89	204.46	149.57

Решение полной системы уравнений газовой динамики в эйлеровом приближении было получено с использованием коммерческого кода Metacomptech CFD++ [15]. Расчеты выполнялись с размерными переменными, результаты приводились к безразмерным величинам и сравнивались с решением системы обыкновенных дифференциальных уравнений (6).

В табл. 2 приведены результаты расчетов. Видно, что максимальное различие предсказанных и рассчитанных значений X_{cr} и τ_{cr} не превосходит 8 %. Точность предсказаний на основе системы (6) можно считать хорошей, учитывая предположения, лежащие в основе теории, представленной в настоящей работе.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе применение развиваемого в [1] подхода представлено на примере задачи о формировании ударной волны в пространственно неоднородной самовоспламеняющейся среде для случая, когда скорость тепловыделения описывается реакцией первого порядка с аррениусовой зависимостью скорости от температуры. Показано, что только энергия активации и начальный градиент температуры определяют положение характеристики, на которой формируется ударная волна, и предложены соответствующие оценки пространственного масштаба системы (см. уравнения (10) и (11)). В то же время имеется инвариантная величина, которая не зависит от параметров системы, — это скорость спонтанного пламени в начальной точке характеристики X_{0cr} , $W_{sp,hr}(X_{0cr}) = 2.5$ при показателе адиабаты 1.4.

В дальнейшем предполагается распространить предложенный подход на разветленно-цепную кинетику тепловыделения, пред-

ставляющую более реалистичную модель процессов горения газов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Заев И. А., Кириллов И. А.** Транспортное уравнение для газодинамических возмущений в пространственно неоднородной самовоспламеняющейся среде // Физика горения и взрыва. — 2008. — Т. 44, № 3. — С. 72–80.
2. **Zeldovich Ya. B.** Regime classification of an exothermic reaction with nonuniform initial conditions // Combust. Flame. — 1980. — V. 39. — P. 211–214.
3. **Тодес О. М.** Адиабатический тепловой взрыв // Журн. физ. химии. — 1933. — Т. 4, № 1. — С. 71.
4. **Zeldovich Ya. B., Librovich V. B., Makhviladze G. M., Sivashinsky G. I.** Development of detonation in a non-uniformly pre-heated gas // Astronaut. Acta. — 1970. — V. 15. — P. 313–321.
5. **Махвиладзе Г. М., Рогатых Д. И.** Начальные неоднородности температуры и концентрации — причина взрывного протекания химической реакции в горючем газе // Хим. физика. — 1989. — Т. 8, № 2. — С. 272–285.
6. **Гельфанд Б. Е., Поленов А. Н., Фролов С. М., Цыганов С. А.** Возникновение детонации в системах с неоднородным распределением температуры и концентрации // Хим. физика. — 1986. — Т. 5, № 9. — С. 1277–1284.
7. **Dold J. W., Kapila A. K., Short M.** Theoretical description of the Direct initiation of detonation for one-step chemistry // Dynamic structure of detonation in Gaseous and dispersed media / A. A. Borisov (Ed.). — Kluwer Academic Publ., 1991.
8. **Short M.** On the critical conditions for the initiation of a detonation in a non-uniformly perturbed reactive fluid // SIAM J. Appl. Math. — 1977. — V. 57, N 5. — P. 1242–1280.
9. **Short M., Dold J. W.** Weak detonations, their paths and transition to strong detonation // Combust. Theory Modelling. — 2002. — V. 6. — P. 279–296.
10. **Kapila A. K., Schwendeman D. W., Quirk J. J., Hawa T.** Mechanisms of detonation formation due to a temperature gradient // Ibid. — P. 553–594.
11. **Clarke J. F.** Small amplitude gasdynamic disturbances in an exploding atmosphere // J. Fluid Mech. — 1978. — V. 89, pt 2. — P. 343–355.
12. **Shepherd J. E.** Chemical kinetics of hydrogen-air-diluent detonations // PAA. — 1986. — V. 106. — P. 263–293.
13. **Browne S., Liang Z., Shepherd J. E.** Detailed and simplified chemical reaction mechanisms for detonation simulation. Fall 2005 Western States Section of the Combustion Institute, Stanford University, Oct. 17–18 2005. <http://www.galcit.caltech.edu/stbrowne/Papers/wssci2005.pdf>.
14. <http://www.kintech.ru>.
15. <http://www.metacomptech.com>.

*Поступила в редакцию 25/XII 2007 г.,
в окончательном варианте — 8/IV 2008 г.*