

И в а н о в М. Ф., К и в е р и н А. Д.,  
Г а л ь б у р т В. А.

## **ОБ ОДНОМ СПОСОБЕ УСКОРЕНИЯ ПЕРЕХОДА ОТ ДЕФЛАГРАЦИИ К ДЕТОНАЦИИ В ГАЗООБРАЗНЫХ ГОРЮЧИХ СМЕСЯХ**

*Приведены результаты исследований возможности ускорения распространения пламени путем дополнительного импульсного вложения энергии вблизи фронта горения. Исследования проведены методами численного моделирования с использованием двумерной гидродинамической модели горения предварительно перемешанной горючей смеси с учетом теплопроводности, многокомпонентной диффузии и химической кинетики. Рассмотрено распространение фронта горения в плоском канале, заполненном стехиометрической водородно-воздушной смесью при учете взаимодействия фронта горения с пограничным слоем у стенок канала. Обнаружено значительное ускорение развития неустойчивости Дарье–Ландау при воздействии на фронт пламени слабых ударно-волновых возмущений. Этот эффект может быть одной из причин быстрого перехода к детонации в газообразной горючей смеси.*

Анализ условий инициирования детонации в горючей смеси — одна из центральных задач при разработке перспективных детонационных двигателей и при оценке взрывобезопасности работ с такими смесями. В первом случае цель исследований — выработка эффективных методов управления переходом дозвукового горения в детонацию (ПГД) на заранее установленных расстояниях в заданный момент времени. Для задач безопасности главным является оценка интенсивности внешних воздействий (ударно-волновых, тепловых и др.), способных привести к несанкционированному взрыву. Хорошо известен прямой путь возбуждения детонации за счет интенсивного импульсного энерговложения в локальном объеме горючего газа [1]. В этом случае в распространяющейся от места энерговложения ударной волне практически сразу создаются условия, необходимые для самоподдерживающейся экзотермической реакции. Эти же условия могут быть достигнуты и в результате интенсификации газодинамических течений перед фронтом горения. Так, хорошо известен способ возбуждения детонации путем турбулизации среды [2, 3]. Еще одним механизмом, приводящим к локальному сжатию и разогреву горючей смеси, служит неустойчивость Дарье–Ландау (ДЛ), в результате которой происходит искривление и ускорение фронта пламени [4]. В этом случае фронт пламени играет роль поршня, генерирующего в свежей смеси волну сжатия нарастающей интенсивности. Однако, как показывают оценки, возникающая ударная волна, если и приводит к ПГД, то только на достаточно больших расстояниях от места инициирования пламени (от трех и более

метров для водородно-воздушной смеси). В то же время из результатов теоретических исследований последних лет [5] следует, что ПГД при развитии неустойчивости ДЛ может происходить быстрее (на меньших расстояниях). Развивающаяся на фронте пламени ДЛ-неустойчивость приводит к его искривлению и образованию глубоких складок, заполненных несгоревшей смесью. В этих складках возникает существенно неоднородное распределение температуры, зарождаются “горячие точки” и формируются условия, приводящие к резкому ускорению химических реакций. Особенно ярко эти условия должны реализовываться у стенок канала, где происходит дополнительное выделение энергии за счет трения [6]. Следует ожидать, что ускорение процесса деформации фронта пламени и формирования складок будет способствовать ускорению ПГД. В настоящей работе анализируется возможность достижения этого эффекта за счет дополнительной деформации фронта пламени путем небольшого локального энергозложения перед фронтом.

**Постановка задачи и математическая модель.** Исследовалось воздействие на зону горения слабой ударной волны от дополнительного энергозложения перед фронтом пламени, распространяющегося в предварительно перемешанной стехиометрической водородно-воздушной смеси. Задачу рассматривали в плоской постановке. Горючей смесью заполнен ограниченный адиабатическими стенками и закрытый с одного конца канал шириной 0,005 м и протяженностью 0,12...0,24 м.

В основу математической модели положены уравнения Навье–Стокса с учетом теплопроводности, многокомпонентной диффузии и энерговыделения за счет химических реакций. Коэффициенты переноса, а также уравнения состояния несгоревшей смеси и продуктов горения соответствовали параметрам реальных смесей. Уравнения в эйлеровых переменных имеют вид

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

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + u \frac{\partial c_i}{\partial x} + v \frac{\partial c_i}{\partial z} = \frac{1}{\rho} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho D_i \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \rho D_i \frac{\partial c_i}{\partial z} \right) \right] + \left( \frac{\partial c_i}{\partial t} \right)_{\text{хим}};$$

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

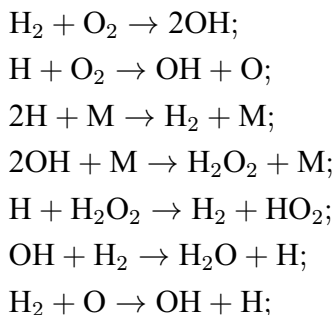
$$\rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z};$$

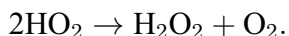
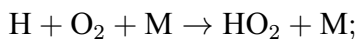
$$\rho \left( \frac{\partial E}{\partial t} + u \frac{\partial E}{\partial x} + v \frac{\partial E}{\partial z} \right) = - \left( \frac{\partial (pu)}{\partial x} + \frac{\partial (pv)}{\partial z} \right) +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\partial}{\partial x} (\sigma_{xx}u + \sigma_{xz}v) + \frac{\partial}{\partial z} (\sigma_{zx}u + \sigma_{zz}v) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \kappa(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \\
& + \sum_k \frac{h_k}{m_k} \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho D_k(T) \frac{\partial c_k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \rho D_k(T) \frac{\partial c_k}{\partial z} \right) \right); \\
p & = RTn = \left( \sum_i \frac{R}{m_i} c_i \right) \rho T = \rho T \sum_i R_i c_i; \\
\varepsilon & = c_v T + \sum_k \frac{h_k n_k}{\rho} = c_v T + \sum_k h_k c_k; \\
\sigma_{xx} & = 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial z} \right); \\
\sigma_{zz} & = 2\mu \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{2}{3}\mu \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial z} \right); \\
\sigma_{zx} & = \sigma_{xz} = \mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right).
\end{aligned}$$

Здесь  $\rho$  — плотность;  $p$  — давление;  $u, v$  — компоненты скорости;  $c_i = \rho_i/\rho$  — массовые концентрации отдельных компонентов, участвующих в реакции;  $E = \varepsilon + (u^2 + v^2)/2$  — плотность полной энергии смеси;  $\varepsilon$  — плотность внутренней энергии;  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $R_i = R/m_i$ ,  $m_i$  — масса моля  $i$ -го компонента;  $n$  — молярная плотность смеси;  $\sigma_{ij}$  — компоненты тензора вязких напряжений;  $c_v = \sum_i c_{vi} c_i$  — удельная теплоемкость смеси при постоянном объеме;  $h_i$  — удельная энтальпия образования  $i$ -го компонента;  $\kappa(T)$ ,  $\mu(T)$  — коэффициенты теплопроводности и вязкости смеси соответственно;  $D_i(T)$  — коэффициент диффузии  $i$ -го компонента в многокомпонентной среде;  $\left( \frac{\partial c_i}{\partial t} \right)_{\text{ХИМ}}$  — изменение концентрации  $i$ -го компонента за счет химических превращений.

Для описания химической кинетики использовалась редуцированная схема окисления водорода [7]





В приведенных уравнениях  $M$  обозначает любую частицу, которой передается избыточная энергия, выделяющаяся в результате элементарного акта. При этом считается, что азот воздуха не участвует в химических реакциях окисления и его молекулы присутствуют только в качестве частиц, принимающих избыточную энергию. Константы скоростей химических реакций и энтальпия образования продуктов реакций приведены в работе [7]. Кинетические коэффициенты и теплоемкости отдельных элементов как функции температуры взяты из стандартных таблиц [8] и пересчитаны по известным формулам на случай многокомпонентной смеси [9].

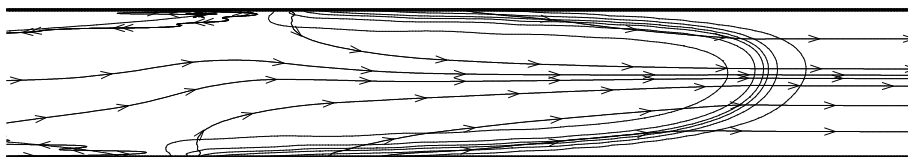
Приведенная система гидродинамических уравнений совместно с уравнениями химической кинетики решалась численно лагранжево-эйлеровым методом [10] первого порядка точности по времени и второго по пространству, модифицированным и апробированным в работах [11, 12]. На стенках канала задавались условия прилипания. На закрытом (левом) конце канала задавались условия, необходимые для поджига горючей смеси и формирования плоской волны горения. Далее от области поджига пламя распространялось по направлению открытого конца канала, на котором задавались условия свободного протекания [13]. Когда процесс распространения пламени выходил на стационарный режим, задавалось дополнительное импульсное энерго-вложение. Размеры счетных ячеек составляли  $0,05 \times 0,05$  мм<sup>2</sup>. Система уравнений химической кинетики решалась методом Гира [14].

**Анализ результатов численных экспериментов.** В большинстве расчетов дополнительный импульс, влияющий на дальнейшую эволюцию процесса горения в канале, задавался путем выделения энергии порядка 6 Дж/м за 3 мкс в области диаметром  $10^{-3}$  м перед фронтом горения. При этом температура в эпицентре энерго-вложения поднималась на 1200 К. Выбранные таким образом параметры возмущения не приводят к дополнительному воспламенению, так как время достижения волной разгрузки центра области энерго-вложения в данном случае меньше времени индукции горючей смеси. Интенсивность ударной волны, исходящей из зоны энерго-вложения на момент достижения ею фронта пламени, составляла 1,3... 1,5 атм и приводила к искажению фронта пламени. Естественным образом форма возмущения зависела от места локализации энерго-вложения. Однако через небольшой промежуток времени, за который фронт пламени успевал переместиться примерно на 0,02 м, возмущения на фронте самоорганизовывались и

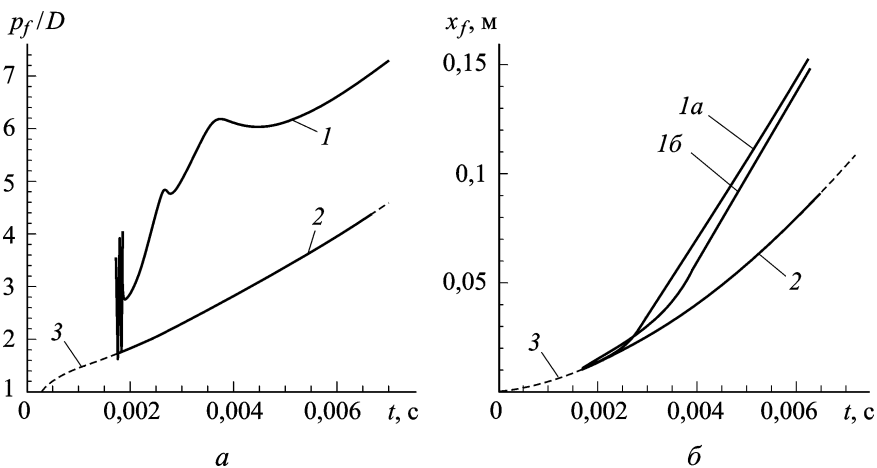
форма фронта независимо от положения начального возмущения приобретала вид, соответствующий развитию ДЛ-неустойчивости в каналах и трубах [15, 16].

Для более детального анализа влияния дополнительного энерго-вложения на неустойчивость и ускорение пламени были проведены расчеты горения при слабом начальном возмущении фронта (необходимом для возникновения ДЛ-неустойчивости), но без дополнительного энерго-вложения, и при импульсном возмущении смеси перед движущимся плоским фронтом. Расчеты проводились как при условии проскальзывания (гладкие стенки), так и при условии прилипания газовой смеси к стенкам канала. При рассмотрении динамики фронта только за счет ДЛ-неустойчивости задавалось два вида начальных возмущений с волновыми векторами  $k = \pi/D$  и  $k = 2\pi/D$ , где  $D$  — ширина канала; возмущения накладывались на массовую скорость на начальной стадии процесса, когда фронт пламени был плоским, и составляли 1 % от локального значения скорости.

Теоретический анализ и численное моделирование [15–17] показывают, что развитие ДЛ-неустойчивости в каналах с гладкими стенками (без прилипания) и с учетом вязкого погранслоя (стенки с прилипанием) протекает принципиально различным образом. Так, в случае гладких стенок ускорение пламени, вызванное ДЛ-неустойчивостью, при выходе процесса на нелинейную стадию прекращается за счет действия стабилизирующих факторов [17]. Форма фронта стабилизируется, а его скорость остается квазипостоянной. В случае вязких граничных условий на стенках стабилизации пламени не происходит [15, 16], фронт пламени вытягивается по направлению распространения волны горения (рис. 1) и продолжает ускоряться, что теоретически может привести к переходу в детонационный режим. В результате проведенного численного моделирования показано, что даже небольшое дополнительное энерго-вложение значительно увеличивает скорость распространения фронта пламени в вариантах с вязкими граничными условиями на стенках, это увеличивает вероятность перехода в детонационный режим (рис. 2). Значительное увеличение скорости пламени, естественно, приводит к возрастанию интенсивности



**Рис. 1.** Изотермы и линии тока вблизи зоны реакции, сформированные в результате развития ДЛ-неустойчивости при дополнительном энерго-вложении и условии прилипания к стенкам канала



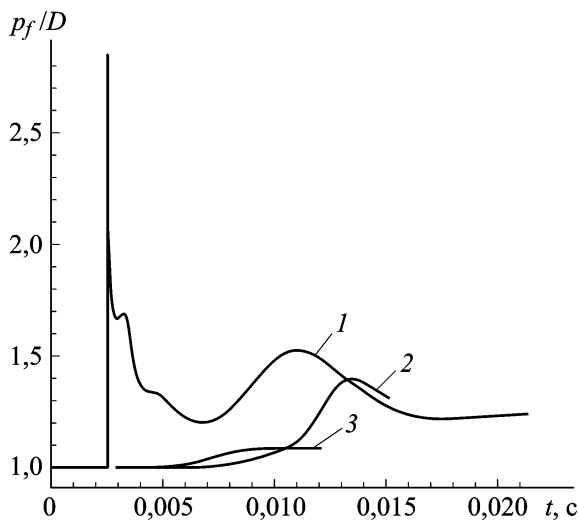
**Рис. 2.** Изменение во времени периметра (площади поверхности пламени), отнесенного к ширине канала,  $p_f/D$  (а) и координат фронта пламени (б) с учетом прилипания потока к стенкам канала:

1 — при дополнительном энерговыкладе (1а — координата фронта на верхней и 1б — на нижней границах канала); 2 — начальное возмущение с  $k = \pi/D$ ; 3 — изначально плоский фронт пламени

ударной волны, движущейся перед фронтом. Однако, по-видимому, ускорение пламени оказывает наибольшее влияние на режим горения вблизи стенок канала, где образуются глубокие складки с захваченным в них несгоревшим горючим. Согласно предположениям, сделанным в работе [5] на основе расчетов с упрощенной моделью химической кинетики, в образовавшихся складках за счет теплопередачи от зоны горения, трения в пристеночной области и переотражения ударных волн могут возникать так называемые горячие точки с повышенной температурой и скоростью реакций, в которых реализуется переход в детонацию в соответствии с теорией Зельдовича [18, 19]. Очевидно, что как разогрев горючего в результате трения, так и интенсивность ударных волн, переотраженных от стенок, возрастают с ростом скорости распространения пламени, что повышает возможность перехода в детонационный режим.

Отметим, что в менее реалистичном случае гладких стенок слабое дополнительное возмущение фронта практически не нарушает процесс его стабилизации, который развивается аналогично эволюции ДЛ-неустойчивости (рис. 3).

**Выводы.** Из приведенного анализа следует, что даже слабая ударная волна, вызванная энерговыделением перед фронтом пламени, может значительно ускорить распространение пламени в канале. Таким образом, возникает принципиальная возможность быстрого перехода к детонации при энерговыделениях примерно в 50 раз меньших, чем минимально необходимое для прямого инициирования детонации в



**Рис. 3.** Изменение во времени периметра пламени, отнесенного к ширине канала ( $p_f/D$ ) с гладкими стенками, для изотермы 1000 К:

1 – с дополнительным энерговкладом; 2, 3 – начальное возмущение с  $k = \pi/D$  и  $k = 2\pi/D$  соответственно

водородно-воздушной смеси [1]. Учет этого фактора может быть полезным при разработке методов управления переходными режимами горения. В то же время высокая восприимчивость режима горения к относительно слабым возмущениям может явиться причиной несанкционированного взрыва горючей смеси при техногенных авариях.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lee J. H. Initiation of gaseous detonation // *Annals Review Physic Chemistry*. – 1977. – V. 28. – P. 75–104.
2. Щелкин К. И., Трошин Я. К. Газодинамика горения. – М.: Изд-во АН СССР, 1963. – 256 с.
3. Oppenheim K., Soloukhin R. I. Experiments in gasdynamics of explosion // *Am. Rev. Fluid Mech.* – 1973. – Vol. 5. – P. 31–58.
4. Liberman M. A., Golberg S. M., Bychkov V. V., Ericsson L. -E. Numerical studies of hydrodynamically unstable flame propagation in 2D channels // *Combust. Sci. Tech.*, 1998. – V. 136. – P. 221–242.
5. Liberman M. A., Sivashinsky G. I., Valiev D. M., Ericsson L. -E. Numerical simulation of deflagration-to-detonation transition. Role of hydrodynamic instability // *The international Journal of transport phenomena*. – 2006. – V. 8(3). – P. 253–277.
6. Brailovskiy I., Sivashinsky G. I. Hydraulic resistance as a mechanism for deflagration-to-detonation transition // *Combustion Flame*. – 2000. – Vol. 122. – P. 492–499.
7. Гальбурт В. А., Иванов М. Ф., Петухов В. А. Математическое моделирование различных режимов развития горения в конусе // *Химическая физика*. – 2007. – Т. 26, № 2. – С. 46.
8. Stull D. R., Prophet H. *Thermochemical Tables*. 2<sup>nd</sup> ed., Washington. Department of Commerce, National Bureau of Standards, 1971.
9. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. *Горение*. – М.: Физматлит, 2003.

10. Белоцерковский О. М., Давыдов Ю. М. Метод крупных частиц в газовой динамике. Вычислительный эксперимент. – М.: Наука, 1982.
11. Liberman M. A., Ivanov M. F., Peil O. E., Valiev D. M., Eriksson L. -E. Numerical modeling of the propagating flame and knock occurrence in spark-ignition engines // *Combust. Sci. and Tech.* – 2005. – V. 177. – № 1. – P. 151–182.
12. Liberman M. A., Ivanov M. F., Valiev D. M., Eriksson L. -E. Hot spot formation by the propagating flame and the influence of EGR on knock occurrence in SI engines // *Combust. Sci. and Tech.* – 2006. – V. 178, № 9. – P. 1613–1647.
13. Ильгамов М. А., Гильманов А. Н. Неотражающие условия на границах расчетной области. – М.: Физматлит, 2003.
14. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – М.: Мир, 1999.
15. Akkerman V., Bychkov V., Petchenkola A., Eriksson L. -E. Accelerating flames in cylindrical tubes with nonslip at the walls // *Combustion Flame.* – 2006. – Vol. 145. – P. 206–219.
16. Bychkov V., Petchenkola A., Akkerman V., Eriksson L. -E. Theory and modeling of accelerating flames in tubes // *Phys. Rev. E.* 2005. – Vol. 72. – P. 046307-1.
17. Liberman M. A., Ivanov M. F., Peil O. E., Valiev D. M., Eriksson L. -E. Numerical studies of curved stationary flames in wide tubes // *Combust. Theory and Modelling.* – 2003. – V. 7. – P. 653–676.
18. Zel'dovich Ya. B., Librovich V. B., Makhviladze G. M., Sivashinsky G. I. On the development of detonation in non-uniformly preheated gas // *Astronautica Acta.* – 1970. – V. 15. – P. 313–321.
19. Zel'dovich Ya. B. Regime classification of an exothermic reaction with nonuniform initial conditions // *Combustion Flame.* – 1980. – V. 39. – P. 211–226.

Статья поступила в редакцию 26.03.2008

Михаил Федорович Иванов родился в 1945 г., окончил МГУ им. М.В. Ломоносова в 1968 г. Д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий лабораторией Объединенного института высоких температур РАН. Автор 200 научных работ, в том числе 2 монографий, в области вычислительной физики, физики плазмы и физической газодинамики.

M.F. Ivanov (b. 1945) graduated from the Lomonosov Moscow State University in 1968. D. Sc. (Phys.-Math.), head of laboratory of Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences. Author of 200 publications including 2 monographs in the field of computational physics, physics of plasma, and physical gas dynamics.

Алексей Дмитриевич Киверин родился в 1985 г. Студент МГТУ им. Н.Э. Баумана. Стажер-исследователь Объединенного института высоких температур РАН. Специализируется в области вычислительной физики и физической газодинамики.

A.D. Kiverin (b. 1985) - student of the Bauman Moscow State Technical University, probationer-researcher of Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences. Specializes in the field of computational physics and physical gas dynamics.

Виктор Александрович Гальбурт родился в 1944 г., окончил Московский физико-технический институт в 1969 г. Канд. физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник Объединенного института высоких температур РАН. Автор 120 научных работ в области вычислительной физики и физической газодинамики.

V.A. Gal'burt (b. 1944) graduated from the Moscow Physical and Technical Institute in 1969. Ph. D. (Phys.-Math.), leading researcher of Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences. Author of 120 publications in the field of computational physics and physical gas dynamics.