

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ УДАРНЫХ ВОЛН В ПРОСТРАНСТВЕННО НЕОДНОРОДНОЙ ВОСПЛАМЕНЯЮЩЕЙСЯ СРЕДЕ ДЛЯ РАЗВЕТВЛЕННО-ЦЕПНОЙ КИНЕТИКИ РЕАКЦИИ ГОРЕНИЯ

И. А. Заев, И. А. Кириллов

РНЦ «Курчатовский институт», 123182 Москва, zaev@kintech.ru

Для реакций горения с разветвленно-цепной кинетикой масштабы времени индукции и тепловыделения меняются независимо и могут как существенно различаться, так и быть сравнимы в зависимости от начальных условий. Проведено теоретическое исследование влияния скорости и кинетического закона тепловыделения на механизмы и условия формирования ударной волны в пространственно неоднородной воспламеняющейся среде — первой стадии инициирования детонации в системах с градиентом времени индукции. В основе исследования лежит метод транспортных уравнений, развитый авторами ранее.

Ключевые слова: горение, разветвленно-цепная реакция, кинетика, инициирование детонации.

ВВЕДЕНИЕ

Переход горения в детонацию, «стук» в двигателях внутреннего сгорания относится к числу явлений, в которых инициирование детонации происходит в локальных неоднородностях в газе, состояние которого близко к условиям самовоспламенения. Я. Б. Зельдовичем и коллегами было показано [1], что наблюдаемые явления объясняются существованием неоднородного распределения температуры в реагирующей среде, в результате чего воспламенение соседних объемов газа происходит не одновременно, а с некоторой задержкой. При определенных условиях [2] (градиент температуры, время индукции) в области с неоднородным распределением температуры после начала воспламенения возможно появление детонационной волны.

В большинстве работ (см. [1, 3–8]) теоретическое исследование инициирования детонации в пространственно неоднородной самовоспламеняющейся среде (численные расчеты и развитие аналитических методов) проводилось для одностадийной реакции горения, скорость которой зависела от температуры по закону Аррениуса. Недостатком этого типа химической реакции следует считать то, что масштабы времени индукции и времени тепловыделения не являются независимыми. При воспламенении практически важных горючих газов (водород, метан, пропан) в зависимости от начальных давления, температуры и состава смеси масштабы времен индукции и тепловы-

деления изменяются независимо друг от друга, что обусловлено различием химических реакций, определяющих скорость каждой стадии горения.

Исследованию инициирования детонации в самовоспламеняющейся среде с неоднородным распределением температуры с учетом независимых масштабов времен индукции и тепловыделения посвящена работа [9], где разветвленно-цепная кинетика реакции горения моделировалась на основе двухстадийной модели с независимо изменяющейся скоростью тепловыделения. Было показано, что в зависимости от соотношения времен тепловыделения и индукции возможны различные сценарии инициирования детонации, отличающиеся от наблюдаемых в случае аррениусовой кинетики, при условии что остальные параметры остаются теми же.

В работе [10] выполнен анализ режимов распространения фронта реакции от сферического «горячего пятна» в смесях H_2 —CO—воздух и H_2 —воздух с использованием детальной кинетической схемы. Наблюдалось пять различных режимов распространения фронта реакции от «горячей точки» и было показано, что границы между различными режимами зависят от времени возбуждения тепловыделения (подобно времени тепловыделения), а критерий Зельдовича [2] для границ инициирования детонации должен быть уточнен с учетом изменения масштаба времени, за которое выделяется запасенная в системе химическая энергия.

Согласно [3, 11] инициирование детонации при воспламенении пространственно неоднородной реагирующей среды происходит в несколько этапов: распространение сверхзвукового замедляющегося фронта горения без ударных волн (волна самовоспламенения), формирование импульса сжатия и его переход в ударную волну, образование связанного комплекса «ударная волна — фронт реакции» и переход к структуре квазистационарной детонационной волны. Таким образом, важную роль в процессе инициирования детонации играет формирование ударной волны, и исследование роли стадии тепловыделения в формировании ударных волн важно для понимания общих закономерностей инициирования детонации при воспламенении неоднородной реагирующей среды.

В настоящей работе исследуются условия и механизмы формирования ударной волны в пространственно неоднородной среде для случая разветвленно-цепной кинетики горения. Исследование проводится в рамках подхода, развитого авторами в [12] и применявшегося к исследованию формирования ударных волн для случая аррениусовой кинетики реакции горения [13]. Разветвленно-цепная реакция моделируется двухстадийной моделью Коробейникова — Левина [14, 15].

1. ВРЕМЕНА ИНДУКЦИИ И ТЕПЛОВЫДЕЛЕНИЯ В РЕАКЦИИ С АРРЕНИУСОВОЙ И РАЗВЕТВЛЕННО-ЦЕПНОЙ КИНЕТИКОЙ

Для простой химической реакции, скорость которой зависит от температуры по закону Аррениуса, отношение времени тепловыделения t_{hr} к времени индукции t_{ind} определяется только начальной температурой, энергией активации и тепловым эффектом химической реакции и не зависит от начального давления.

Для разветвленно-цепной реакции масштабы времен индукции и тепловыделения независимы и определяются не только начальной температурой, но и давлением. Обычно с ростом давления время тепловыделения уменьшается быстрее, чем время индукции.

На рис. 1 приведена зависимость отношения t_{hr}/t_{ind} от начальной температуры стехиометрической смеси водород — воздух при давлении 5 и 1 атм (расчет с детальной кинетической схемой, линии 1, 2 соответственно), а также от начальной температуры реагирующей

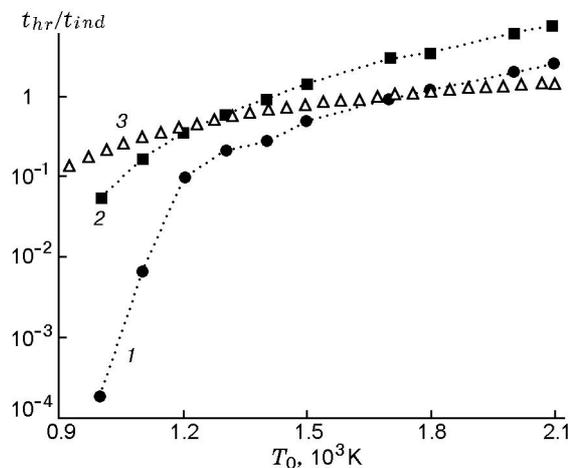


Рис. 1. Отношение времени тепловыделения к времени индукции при изменении начальной температуры для разветвленно-цепной реакции горения стехиометрической смеси водорода с воздухом при давлении 5 (1) и 1 атм (2) и для одностадийной реакции (3):

эффективные параметры систем 1–3 одинаковы (эффективная энергия активации 66 000 Дж/моль, теплота реакции 71 500 Дж/моль)

смеси, скорость реакции в которой описывается простой реакцией первого порядка, а теплота реакции и энергия активации совпадают с эффективными параметрами стехиометрической смеси водород — воздух при температуре $T > 1300 \text{ К}$ (линия 3). Эффективная энергия активации вычислялась по зависимости времени индукции от температуры:

$$E_a = R \left[\frac{d \ln(t_{ind}(T))}{d(1/T)} \right],$$

и при $T > 1300 \text{ К}$ она равнялась 66 000 Дж/моль. Теплота реакции принималась равной 71 500 Дж/моль. Расчеты для смеси водород — воздух проводились с использованием детального кинетического механизма [16] в программе Chemical Workbench [17].

Видно, что при учете реалистичной кинетики разветвленно-цепных реакций отношение t_{hr}/t_{ind} определяется двумя факторами: начальным давлением (обычно при его увеличении отношение t_{hr}/t_{ind} уменьшается); изменением ведущего кинетического механизма при изменении начальной температуры или давления, а значит, эффективной энергии активации для времени индукции (увеличение наклона зависимости $(t_{hr}/t_{ind})(T_0)$ при низких температурах на рис. 1).

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. МОДЕЛЬ КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

В газовой среде с температурой T_a создано локальное начальное возмущение температуры $T_{ini}(x)$ — «горячее пятно» размером $2L$, температура в его центре T_m . Давление p_{ini} одно и то же 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 [12], эволюцию возмущений и точку в пространстве, где формируется ударная волна, можно определить в результате решения следующей системы уравнений:

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

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. Индекс 0 означает, что величины соответствуют волне самовоспламенения, в которой пренебрегается эффектами сжимаемости среды, — спонтанному пламени Зельдовича [2]. Все переменные с индексом 0 являются функциями только времени и координаты и определяются из уравнений структуры спонтанного пламени [12].

Корректное описание формирования ударных волн в неоднородной воспламеняющейся среде с помощью системы уравнений (1) возможно, если

$$c_{ini}(x)/w_{sp}(x) \ll 1,$$

где $c_{ini}(x)$ — начальная скорость звука, $w_{sp}(x)$ — скорость спонтанного пламени Зельдовича, определяемая соотношением [2, 12]

$$w_{sp}(x) = \frac{1}{|\text{grad}(t_{ind}(T_{ini}(x)))|}.$$

С практической точки зрения наиболее интересным представляется случай, когда при начальных условиях (T_{ini} , p_{ini} , L , T_m , T_a) в неоднородной среде возможно формирование детонации. Как показали численные расчеты [1, 3–10], в этом случае

$$w_{sp}(x) \approx D_{СД},$$

где $D_{СД}$ — скорость Чепмена — Жуге для заданных условий. Так как

$$D_{СД} \gg c_{ini}(x),$$

то применение системы уравнений (1) для исследования формирования ударных волн в неоднородной воспламеняющейся среде оправданно.

Разветвленно-цепные химические реакции горения характеризуются двумя масштабами времени: временем индукции t_{ind} и временем тепловыделения t_{hr} . Для их описания в настоящей работе используется двухстадийная модель Коробейникова — Левина [14, 15]. Степень протекания реакции определяется массовой долей продукта реакции горения Y . Изменение Y во времени описывается дифференциальным уравнением

$$\frac{dY}{dt} = \begin{cases} 0, & 0 \leq t \leq t_{ind}, \\ \frac{(1-Y)^n}{t_{hr}}, & t > t_{ind}, \end{cases} \quad (2)$$

с начальным условием $Y(0) = 0$, где n — порядок реакции. Производная в уравнении (2) является субстанциональной. При изохорном адиабатическом сгорании температура связана с массовой долей продукта реакции горения законом сохранения энергии

$$T = T_{ini} + Y \frac{Q}{c_v}, \quad (3)$$

где T_{ini} — начальная температура, Q — удельная теплота реакции, c_v — удельная теплоемкость смеси. Уравнения (2) и (3) отражают тот факт, что на стадии индукции реакции горения тепло не выделяется, температура остается равной своему начальному значению. Запасенная химическая энергия выделяется на стадии тепловыделения.

В дальнейшем считается, что время индукции зависит от начальной температуры по закону Аррениуса:

$$t_{ind}(T_{ini}) = t_0 \exp\left(\frac{E_a}{RT_{ini}}\right), \quad (4)$$

где t_0 — константа, E_a — эффективная энергия активации для реакции на стадии индукции, R — универсальная газовая постоянная. Время тепловыделения t_{hr} не зависит от начальной температуры и при заданном начальном давлении p_{ini} считается постоянной величиной. Рассматриваемая модель кинетики аналогична двухстадийной модели разветвленно-цепных реакций, принятой в работе [9] при проведении газодинамических расчетов инициирования детонации. Отличие состоит в дополнительном введении порядка реакции по концентрации вещества с целью установить его роль в формировании ударной волны при воспламенении пространственно неоднородной среды.

Выбранная модель кинетики разветвленно-цепных реакций позволяет аналитически описать структуру спонтанного пламени Зельдовича. Например, при $n > 1$ для температуры имеем

$$T_0(t, x) = \begin{cases} T_{ini}(x), & 0 < t < t_{ind}(T_{ini}(x)); \\ T_{ini}(x) + \frac{Q}{c_v} \left[1 - \frac{1}{\left(1 + (n-1) \frac{t - t_{ind}(T_{ini}(x))}{t_{hr}}\right)^{1/(n-1)}} \right], & t > t_{ind}(T_{ini}(x)). \end{cases}$$

Подобные формулы могут быть получены и для случаев $n = 1$, $n < 1$.

Введем 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:

$$\tau = \frac{t}{t_{ind}(T_m)}, \quad X = \frac{x}{c_b t_{ind}(T_m)}, \quad C_0 = \frac{c_0}{c_b},$$

$$\theta = \frac{T}{T_b}, \quad \Phi = \varphi t_{ind}(T_m), \quad \Xi = \frac{\xi}{c_b} t_{ind}(T_m),$$

$$P = \frac{p}{p_{ini}}, \quad R_0 = \frac{\rho_0 R T_b}{p_{ini} M}, \quad \Psi = H R \frac{t_{ind}(T_m)}{p_{ini}},$$

где $c_b = (\gamma R T_b / M)^{1/2}$, M — молекулярная масса реагирующей смеси. В качестве масштаба времени принято время индукции в самой «горячей точке» при температуре T_m , масштаба температуры — величина $T_b = Q / c_v$, масштаба скорости — скорость звука c_b при температуре T_b .

Тогда систему уравнений (1) можно переписать в безразмерном виде:

$$\begin{aligned} \left(\frac{dX}{d\tau}\right)_\sigma &= C_0(X, \tau), \quad X(\tau = \tau_0, \sigma) = X_0; \\ \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \tau}\right)_\sigma &= \frac{\gamma + 1}{2} \Phi^2 + \frac{1}{2} \Phi \left[\frac{\partial \Psi}{\partial P} + \right. \\ &+ \left. \frac{1}{C_0^2} \frac{\partial \Psi}{\partial R} - \frac{1}{R_0 C_0} \left(\frac{\partial (R_0 C_0)}{\partial \tau} \right)_\sigma \right] + \frac{(C_0 P_0 \Xi) \Xi}{2 R_0 C_0}, \\ \Phi(\tau = \tau_0, \sigma) &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Начальное распределение температуры в безразмерных переменных имеет вид

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

где используются следующие безразмерные параметры: $\theta_m = \frac{T_m}{T_b}$ — температура в центре «горячего пятна», $\theta_a = \frac{T_a}{T_b}$ — температура окружающей среды, $\Lambda = \frac{L}{c_b t_{ind}(T_m)}$ — полуширина «горячего

пятна», $g = \frac{G c_b t_{ind}(T_m)}{T_b}$ — градиент температуры, G — градиент температуры в «горячем пятне», К/м.

Уравнения (2)–(4) в безразмерных переменных переписываются следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{dY}{dt} &= \begin{cases} 0, & 0 \leq \tau \leq \tau_{ind}, \\ \frac{(1-Y)^n}{\tau_{hr}}, & \tau > \tau_{ind}, \end{cases} \\ \theta &= \theta_{ini} + Y, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\tau_{ind}(\theta_{ini}) = \exp\left(\frac{\varepsilon_a}{\theta_{ini}} - \frac{\varepsilon_a}{\theta_m}\right), \quad (7)$$

где τ_{hr} — безразмерное время тепловыделения, $\varepsilon_a = E_a / R T_b$ — безразмерная энергия активации.

3. УСЛОВИЯ И МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

Основными безразмерными параметрами рассматриваемой задачи являются температура в центре «горячего пятна» θ_m , эффективная энергия активации ε_a на стадии индукции, градиент температуры g , время тепловыделения τ_{hr} и порядок реакции на стадии тепловыделения n . В работе [13] проводилось детальное исследование влияния первых трех параметров на формирование ударной волны в случае аррениусовой кинетики реакции горения. Можно предположить, что качественно результаты, полученные для θ_m , ε_a и g , не изменятся. Поэтому дальнейшее внимание уделяется только параметрам τ_{hr} и n при различных значениях градиента температуры g , остальные величины фиксированы: $\varepsilon_a = 2.27$, $\theta_m = 0.37$, $\theta_a = 0.255$. Показатель адиабаты смеси газов $\gamma = 1.4$.

3.1. Условия формирования ударной волны

Исследование формирования ударной волны при самовоспламенении пространственно неоднородной реагирующей среды проводилось в соответствии с алгоритмом, описанным в [12]. В результате последовательного решения дифференциальных уравнений из системы (5) определялись: начальная (X_{0cr}) и конечная (X_{cr}) точки критической характеристики, на которой образуется ударная волна; момент времени τ_{cr} формирования ударной волны; параметры, характеризующие условия формирования ударной волны: $W_{sp}(X_{0cr})$ — скорость спонтанного пламени в точке X_{0cr} ; $(\tau_{hr}/\tau_{ind})(X_{0cr})$ — отношение времени тепловыделения к времени индукции в точке X_{0cr} ; $Y(\tau_{cr}, X_{cr})$ — массовая доля продукта реакции в точке формирования ударной волны, которая определяет относительное положение критической характеристики и зоны интенсивного тепловыделения. Здесь скорость спонтанного пламени (безразмерная) определяется уравнением [2]

$$W_{sp}(X) = \left(\frac{d\tau_{ind}(X)}{dX} \right)^{-1}.$$

Результаты расчетов при трех значениях начального градиента температуры приведены в табл. 1. Во всех расчетах порядок реакции принимался равным единице, начальный момент

времени в системе уравнений (5) $\tau_0 = 1$, т. е. время отсчитывалось от момента начала тепловыделения в самой «горячей точке» с температурой θ_m .

Из табл. 1 видно, что при изменении и градиента температуры, и времени тепловыделения величины, характеризующие условия формирования ударной волны, непрерывно изменяются. При фиксированном значении g начальная точка X_{0cr} удаляется от центра «горячей точки» с ростом времени τ_{hr} . В отличие от случая простой реакции, скорость которой описывается законом Аррениуса [13], скорость спонтанного пламени $W_{sp}(X_{0cr})$ не постоянна, а уменьшается.

Сопоставление результатов расчетов из трех последних столбцов табл. 1 показывает, что чем ближе друг к другу значения отношения $(\tau_{hr}/\tau_{ind})(X_{0cr})$ (например, $(\tau_{hr}/\tau_{ind})(X_{0cr}) \approx 0.1$ при $g = 0.005$, $\tau_{hr} = 0.4$ и при $g = 0.002$, $\tau_{hr} = 0.8$), тем меньше различаются и соответствующие значения $W_{sp}(X_{0cr})$ и $Y(\tau_{cr}, X_{cr})$. Таким образом, определяющим параметром задачи можно считать отношение времени тепловыделения ко времени индукции в начальной точке критической характеристики $(\tau_{hr}/\tau_{ind})(X_{0cr})$, а не абсолютную величину τ_{hr} .

Как видно из табл. 1, при увеличении времени тепловыделения точка формирования ударной волны перемещается ближе к фронту начала интенсивной химической реакции, значение $Y(\tau_{cr}, X_{cr})$ уменьшается. Этот эффект также отмечался в работе [9] при численном исследовании инициирования детонации. Он может быть интерпретирован следующим образом.

Пусть градиент температуры фиксирован и при некотором значении τ_{hr} критическая характеристика начинается в точке X_{0cr} . Газодинамические возмущения после прохождения волны самовоспламенения образуются из-за наличия градиента давления. Полный вклад в амплитуду возмущения от спонтанного пламени, описываемый свободным членом во втором уравнении системы (5), можно оценить как

$$I \propto \int_{\tau_{ind}(X_{0cr})}^{\tau_{ind}(X_{0cr}) + \tau_{hr}} \frac{(C_0 P_0 \Xi) \Xi}{2R_0 C_0} d\tau \propto \frac{(C_0 P_0 \Xi) \Xi}{2R_0 C_0} \Big|_{X_{0cr}}^{\tau_{hr}}.$$

Таблица 1

Условия формирования ударной волны в пространственно неоднородной воспламеняющейся среде, полученные на основе решения системы уравнений (5)

g	τ_{hr}	X_{0cr}	X_{cr}	τ_{cr}	$W_{sp}(X_{0cr})$	$(t_{hr}/t_{ind})(X_{0cr})$	$Y(\tau_{cr}, X_{cr})$
0.01	0.1	4.06	5.68	3.30	2.24	0.047	0.92
	0.2	4.59	6.52	3.94	1.94	0.084	0.69
	0.4	4.85	7.26	4.73	1.81	0.159	0.48
	0.8	5.17	8.062	5.75	1.65	0.300	0.24
0.005	0.1	11.80	14.58	4.99	2.661	0.031	0.99
	0.2	13.00	16.18	5.96	2.217	0.054	0.86
	0.4	13.55	17.42	7.08	2.035	0.101	0.69
	0.8	14.20	18.79	8.53	1.835	0.186	0.44
0.002	0.1	41.00	46.06	8.62	3.185	0.017	0.99994
	0.2	43.10	49.19	10.26	2.752	0.031	0.99429
	0.4	45.05	52.20	12.18	2.395	0.056	0.92386
	0.8	46.75	55.09	14.53	2.115	0.100	0.73000

В [1] показано, что

$$\frac{(C_0 P_0 \Xi) \Xi}{2R_0 C_0} \propto \frac{(C_0/W_{sp})^2}{\tau_{hr}^2},$$

поэтому

$$I \propto \frac{(C_0/W_{sp})^2}{\tau_{hr}}.$$

При увеличении времени тепловыделения параметр I уменьшается. Для сохранения его значения следует уменьшить скорость спонтанного пламени W_{sp} , т. е. сдвинуться в область более низких температур, ближе к фронту начала интенсивного тепловыделения.

Из табл. 1 видно, что точка формирования ударной волны X_{cr} заметно продвигается к фронту начала тепловыделения уже при $(\tau_{hr}/\tau_{ind})(X_{0cr}) \approx 0.1$.

3.2. Механизмы формирования ударной волны

Для выяснения механизмов, определяющих формирование ударной волны при изменении времени тепловыделения в широком диапазоне, было рассмотрено два случая: $\tau_{hr} = 0.1$ (рис. 2) и $\tau_{hr} = 0.8$ (рис. 3). Значение градиента температуры $g = 0.005$.

На рис. 2,а приведены: X - τ -диаграмма распространения критической характеристики $\tau(X)$ (линия 1), представляющая собой

решение первого дифференциального уравнения системы (5); фронт волны самовоспламенения $\tau_{ind}(X)$ (линия 2); параметр, характеризующий ширину области тепловыделения, $\tau_{ind}(X) + \tau_{hr}$, $\tau_{hr} = 0.1$ (линия 3). Рис. 2,б иллюстрирует изменение каждого из членов в правой части второго уравнения системы (5): свободного члена, отвечающего за рождение возмущений во фронте волны самовоспламенения; линейного члена, отвечающего за рост градиента газодинамических переменных в возмущении в результате тепловыделения и пространственно неоднородного фона; квадратичного члена Римана, отвечающего за формирование ударной волны (линия 1–3 соответственно). Видно, что критическая характеристика быстро пересекает область интенсивного тепловыделения (см. рис. 2,а), где получает существенный импульс (см. рис. 2,б), однако дальнейшее увеличение градиента газодинамических переменных в возмущении и формирование ударной волны происходят только за счет газодинамической нелинейности при распространении в догорающем газе (квадратичный член). Таким образом, при малых значениях времени тепловыделения роль волны самовоспламенения сводится только к формированию сильного импульса сжатия.

На рис. 3,а,б представлены те же зависимости, что и на рис. 2,а,б, но при $\tau_{hr} = 0.8$.

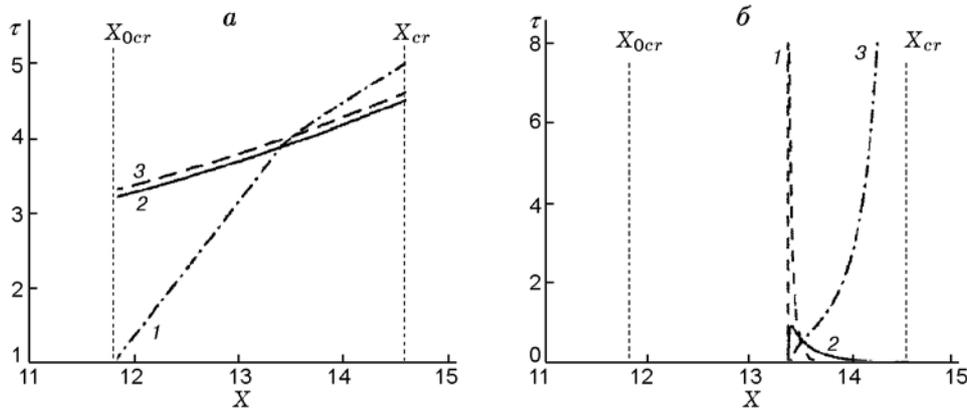


Рис. 2. X - τ -диаграмма волны воспламенения и критической характеристики, на которой формируется ударная волна (а), и изменение членов в правой части уравнения Риккати (5) (б):

а: 1 — критическая характеристика, 2 — фронт спонтанного пламени $\tau_{ind}(X)$, 3 — линия, определяющая характерную ширину зоны реакции $\tau_{ind}(X) + \tau_{hr}$; б: 1 — свободный, 2 — линейный, 3 — квадратичный член; $g = 0.005$, $\tau_{hr} = 0.1$, $\varepsilon_a = 2.27$, $n = 1$, $\theta_m = 0.37$, $\theta_a = 0.255$

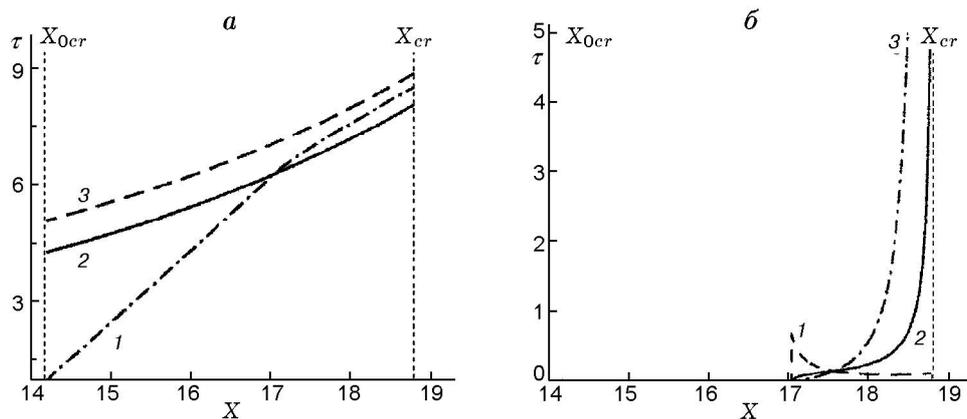


Рис. 3. X - τ -диаграмма волны воспламенения и критической характеристики, на которой формируется ударная волна (а), и изменение членов в правой части уравнения Риккати (5) (б):

$g = 0.005$, $\tau_{hr} = 0.8$, $\varepsilon_a = 2.27$, $n = 1$, $\theta_m = 0.37$, $\theta_a = 0.255$, обозначения те же, что и на рис. 2

Видно, что критическая характеристика распространяется в области интенсивного тепловыделения, при этом свободный и линейный члены в уравнении Риккати (5) остаются существенными все время вплоть до момента образования ударной волны. Несмотря на то, что в этом случае скорость спонтанного пламени не намного превышает начальную скорость звука в точке формирования ударной волны и точность теоретической модели снижается, можно сделать правильный качественный вывод: при времени тепловыделения порядка времени индукции структура фронта волны воспламенения существенна на всех стадиях формирования ударной волны.

3.3. Роль кинетического закона реакции на стадии тепловыделения

В зависимости от порядка реакции n процесс энерговыделения развивается во времени по-разному. При одном и том же значении параметра τ_{hr} вся накопленная в системе химическая энергия выделяется за конечное время $\tau_n = \tau_{hr}/(1 - n)$, если $0 \leq n < 1$, и за бесконечное время, если $n \geq 1$. Независимо от значения n темп энерговыделения в первый момент времени одинаков во всех случаях. На рис. 4 приведена зависимость массовой доли продукта реакции Y от времени при $n = 0, 1$ и 2 . Время тепловыделения $\tau_{hr} = 0.8$, время индукции $\tau_{ind} = 1$.

Таблица 2

Влияние порядка реакции n стадии тепловыделения на условия формирования ударной волны при воспламенении пространственно неоднородной среды

τ_{hr}	n	X_{0cr}	X_{cr}	τ_{cr}	$W_{sp}(X_{0cr})$	$(t_{hr}/t_{ind})(X_{0cr})$	$Y(\tau_{cr}, X_{cr})$
0.1	0	11.80	14.13	4.562	2.66	0.0312	1.000
	1	11.80	14.58	4.997	2.66	0.0312	0.993
	2	11.85	15.00	5.436	2.64	0.0310	0.872
0.8	0	13.35	17.90	7.682	2.100	0.2070	0.756
	1	14.20	18.79	8.527	1.835	0.1860	0.436
	2	14.50	19.22	9.006	1.720	0.1770	0.333

Для исследования роли порядка реакции n в формировании ударной волны проведено две серии расчетов с различными значениями времени тепловыделения τ_{hr} (0.1 и 0.8), результаты которых суммированы в табл. 2. Начальный градиент температуры $g = 0.005$.

Видно, что если отношение $(\tau_{hr}/\tau_{ind})(X_{0cr})$ мало и, согласно п. 3.2, ударная волна образуется в области, где заканчивается стадия тепловыделения, то порядок реакции не изменяет существенно условия, в которых образуется ударная волна. Это объясняется тем, что для малых времен тепловыделения зона интенсивного тепловыделения только создает начальные возмущения.

Если же время тепловыделения имеет тот же порядок, что и время индукции, то в зависимости от порядка реакции n условия, в которых образуется ударная волна, могут заметно

меняться. Так, при $\tau_{hr} = 0.8$ и $n = 0$ ударная волна формируется при приближении к зоне завершения реакции, $Y(\tau_{cr}, X_{cr}) = 0.756$. Но при $\tau_{hr} = 0.8$ и $n = 2$ массовая доля продукта $Y(\tau_{cr}, X_{cr}) = 0.333$, т. е. ударная волна формируется в области, где реакция тепловыделения только начинается. Наблюдаемый эффект обусловлен тем, что при временах тепловыделения порядка времени индукции вклад зоны тепловыделения в образование ударной волны значителен, как было показано в п. 3.2.

Таким образом, в зависимости от соотношения времен τ_{ind} и τ_{hr} роль кинетики тепловыделения (порядок реакции) может быть существенной. Можно предположить, что порядок реакции n также важен и при инициировании детонации в пространственно неоднородной реагирующей среде, когда масштаб времени тепловыделения сравним с масштабом времени индукции.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование формирования ударной волны при воспламенении пространственно неоднородной реагирующей среды проводилось на основе метода решения транспортного уравнения вдоль правой характеристики уравнения газовой динамики, развитого в работе [12]. Принималось, что кинетика химических реакций разветвленно-цепная, с двумя независимыми масштабами времени: индукции t_{ind} и тепловыделения t_{hr} .

Расчеты показали, что основным параметром, определяющим механизм формирования ударной волны, является отношение времени тепловыделения ко времени индукции t_{hr}/t_{ind} в начальной точке критической характеристики X_{0cr} (на которой формируется ударная вол-

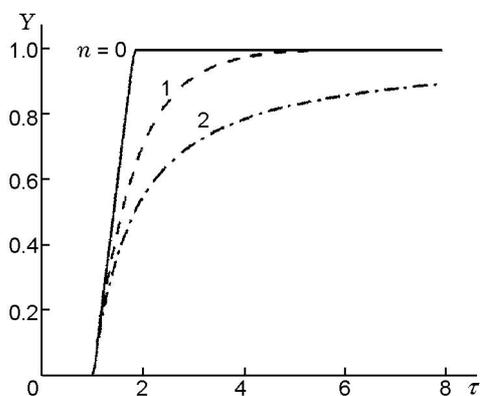


Рис. 4. Изменение массовой доли продукта реакции при различных значениях порядка реакции на стадии тепловыделения ($\tau_{hr} = 0.8$, $\tau_{ind} = 1$)

на). Обобщение результатов расчетов показало, что если $t_{hr}/t_{ind} < 0.1$, то ударная волна формируется в хвосте зоны тепловыделения, в основном за счет газодинамической нелинейности. Если же $t_{hr}/t_{ind} > 0.1$, то существенную роль играет кинетический закон тепловыделения (порядок реакции), а формирование ударной волны происходит в зоне интенсивного тепловыделения.

Преимущество теоретического подхода [12], использованного в настоящей работе, перед прямым решением полной системы уравнений газовой динамики заключается в оперировании объектами, которые непосредственно связаны с распространением возмущений в сжимаемой газовой среде и формированием ударных волн: характеристика уравнений газовой динамики, ее начальная и конечная точки, градиент газодинамических переменных, который стремится к бесконечности при формировании ударной волны. Например, введение начальной точки критической характеристики X_{0cr} позволило установить, что определяющим параметром в формировании ударных волн при воспламенении неоднородной среды является отношение $(t_{hr}/t_{ind})(X_{0cr})$, а его критическое значение равно 0.1.

Результаты, полученные в работе, могут служить отправной точкой для дальнейшего исследования инициирования детонации в пространственно неоднородной среде, так как указаны параметры, являющиеся основными на первой стадии развития процесса: отношение времени тепловыделения ко времени индукции и кинетический закон на стадии тепловыделения.

ЛИТЕРАТУРА

1. 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.
2. Zeldovich Ya. B. Regime classification of an exothermic reaction with nonuniform initial conditions // *Combust. Flame.* — 1980. — V. 39. — P. 211–214.
3. 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.
4. Гельфанд Б. Е., Фролов С. М., Цыганов С. А. К механизму взрывов в газоперекачивающих агрегатах магистральных газопроводов // *Физика горения и взрыва.* — 1988. — Т. 24, № 3. — С. 101–104.
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. Махвиладзе Г. М., Рогатых Д. И. Образование и затухание квазистационарного детонационного комплекса в неравномерно нагретом горючем газе // *Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа.* — 1991. — № 2. — С. 161–168.
7. Short M. On the critical conditions for the initiation of a detonation in a non-uniformly perturbed reactive fluid // *SIAM J. Appl. Math.* — 1997. — V. 57, N 5. — P. 1242–1280.
8. Kapila A. K., Schwendeman D. W., Quirk J. J., Hawa T. Mechanisms of detonation formation due to a temperature gradient // *Combust. Theory Modelling.* — 2002. — V. 6. — P. 553–594.
9. Sharpe G. J., Short M. Detonation ignition from a temperature gradient for a two-step chain-branching kinetics model // *J. Fluid Mech.* — 2003. — V. 476. — P. 267–292.
10. Gu X. J., Emerson D. R., Bradley D. Modes of reaction front propagation from hot spots // *Combust. Flame.* — 2003. — V. 133. — P. 63–74.
11. Bartenev A. M., Gelfand B. E. Spontaneous initiation of detonations // *Progress in Energy and Combust. Sci.* — 2000. — V. 26. — P. 29–55.
12. 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.
13. Заев И. А., Кириллов И. А. Параметрическое исследование формирования ударных волн в пространственно неоднородной самовоспламеняющейся среде для аррениусовой кинетики реакции горения // *Физика горения и взрыва.* — 2009. — Т. 45, № 2. — С. 76–83.
14. Korobeinikov V. P., Levin V. A., Markov V. V., Chernyi G. G. Propagation of blast waves in a combustible gas // *Astronaut. Acta.* — 1972. — V. 17, N 5–6. — P. 529–537.
15. Коробейников В. П. Задачи теории точечного взрыва. — М.: Наука, 1985.
16. Marinov N. M., Westbrook C. K., Pitz W. J. Detailed and global chemical kinetic model for hydrogen // *Eighth (Intern.) Symp. on Transport Processes.* — 1995. — V. 1. — P. 118–129.
17. Deminsky M., Chorkov V., Belov G., Cheshigin I., Knizhnik A., Shulakova E.,

Shulakov M., Iskandarova I., Alexandrov V., Petrushev A., Kirillov I., Strelkova M., Umanski S., Potapkin B. Chemical

workbench — integrated environment for materials science // *Comput. Materials Sci.* — 2003. — V. 28. — P. 169–178.

Поступила в редакцию 10/XI 2008 г.
