

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ  
ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР  
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМ. Н.Э. БАУМАНА

На правах рукописи  
УДК 534.222.2

Яковенко Иван Сергеевич

**РЕЖИМЫ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПЛАМЕНИ В  
ХИМИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ГАЗАХ И ГАЗОВЗВЕСЯХ**

Специальность 01.04.14 —  
«Теплофизика и теоретическая теплотехника»

Диссертация на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук, профессор  
Иванов Михаил Федорович

Москва — 2016

## Оглавление

	Стр.
<b>Введение</b> . . . . .	4
<b>Глава 1. Литературный обзор и выбор математической модели</b>	
<b>динамики реагирующих газовых потоков и газовзвесей</b> . . . . .	17
1.1 Горение и детонация газов и дисперсных сред . . . . .	17
1.2 Нестационарные и переходные режимы горения . . . . .	21
1.3 Математическая модель динамики реагирующих газовых потоков и газовзвесей . . . . .	25
1.3.1 Трехмерная модель газовой динамики реагирующих потоков	26
1.3.2 Вычисление коэффициентов переноса . . . . .	28
1.3.3 Механизм химической кинетики . . . . .	29
1.3.4 Учет влияния дисперсной фазы . . . . .	31
<b>Глава 2. Расчетные алгоритмы и программные средства</b> . . . . .	35
2.1 Численные методы решения системы уравнений математических моделей . . . . .	35
2.2 Объектно-ориентированная программная платформа вычислительного пакета . . . . .	39
<b>Глава 3. Горение газообразных смесей в закрытых объемах.</b> . . . . .	45
3.1 Ускорение пламени и переход к детонации в трехмерном канале. . . . .	45
3.1.1 Структура газодинамических течений формируемых в процессе ускорения пламени. . . . .	50
3.1.2 Роль волн сжатия в развитии горения в канале. . . . .	56
3.1.3 Механизм перехода от медленного горения к детонации в условиях обратной зависимости скорости горения от давления. . . . .	61

3.2	Особенности развития волн горения в низкоактивных смесях. . . . .	66
3.3	Основные результаты. . . . .	74
<b>Глава 4.</b>	<b>Детонация в дисперсных средах. . . . .</b>	<b>75</b>
4.1	Инициирование детонации путем лучистого нагрева локализованного слоя частиц. . . . .	75
4.2	Использование детонации с целью создания направленного движения частиц для задач имплантации. . . . .	87
4.3	Основные результаты. . . . .	95
<b>Глава 5.</b>	<b>Использование метода КАБАРЕ для решения задач газодинамики горения и детонации . . . . .</b>	<b>96</b>
5.1	Адаптация метода КАБАРЕ для расчетов газодинамических поток в реагирующих средах. . . . .	96
5.2	Решение тестовых задач физики горения и детонации методом КАБАРЕ. . . . .	103
5.2.1	Моделирование дозвуковых и сверхзвуковых течений . . . . .	105
5.2.2	Распространение ламинарного пламени . . . . .	107
5.2.3	Нестационарное развитие теплового взрыва на градиенте температуры. . . . .	109
5.2.4	Прямое инициирование детонации. . . . .	111
5.2.5	Распространение пламени в ограниченном объеме от локализованного источника воспламенения. . . . .	113
5.3	Основные результаты. . . . .	117
<b>Заключение</b>	. . . . .	<b>118</b>
<b>Список литературы</b>	. . . . .	<b>120</b>

## Введение

Настоящая работа посвящена исследованию режимов горения химически активных газообразных сред путем детального численного моделирования развития нестационарных процессов горения и детонации в газовых смесях и газозвесах.

### **Актуальность темы.**

Процессы развития волн горения в газовых смесях и газозвесах содержащихся внутри замкнутых объемов остаются предметом многочисленных научных исследований. В первую очередь интерес к этим процессам обусловлен вопросами энергоэффективности тепловых установок, а также необходимостью обеспечения пожаро- и взрывобезопасности на производстве при хранении и использовании высокоактивных топлив. Богатый опыт, накопленный в результате теоретических и экспериментальных исследований, позволил сформулировать надежные модели стационарных режимов дозвукового (дефлаграционного) и сверхзвукового (детонационного) распространения волн горения в газовых смесях. Однако процессы, протекающие внутри реальных технических систем, таких как камеры сгорания двигателей и тепловых машин, помещений химической и горнодобывающей промышленности, контейнментов АЭС при возникновении аварий, являются принципиально нестационарными и развиваются путем последовательной эволюции переходных режимов распространения пламени. Разномасштабность протекающих процессов, принципиальная многомерность, а также большое число определяющих факторов, в значительной степени осложняют всестороннее исследование реальных технических систем путем их теоретического анализа и экспериментальных наблюдений. Значительные успехи в этой области были достигнуты благодаря развитию вычислительных методов. Методами детального численного моделирования были определены механизмы ответственные за формирование и эволюцию режимов распространения волн горения в газовых смесях для некоторого класса модельных задач. Одна-

ко, только с появлением мощных кластерных суперкомпьютеров терафлопсной и петафлопсной производительности стало возможным моделирование процессов горения с учетом детального описания полного спектра физико-химических процессов, сопровождающих распространение волн горения в смесях различного состава и на масштабах присущих реальным экспериментальным установкам и техническим системам.

Данная диссертация посвящена исследованию с применением современных компьютерных средств и методов различных режимов распространения волн горения и детонации в газовых смесях и газовзвесьях и оценке возможностей использования рассматриваемых режимов в прикладных задачах разработки перспективных технических систем и обеспечения пожаро- и взрывобезопасности, что определяет её актуальность. Для выделения фундаментальных процессов, определяющих горение горючих газовых смесей и газовзвесей, рассмотрены предельные случаи горения наиболее химически активных стехиометрических смесей и слабоактивных бедных смесей, газовзвесей с микрочастицами, передающими энергию горючей газовой компоненте, и с микрочастицами, отбирающими энергию от горючей компоненты. В качестве основных были рассмотрены водородосодержащие смеси, что позволяет использовать результаты диссертации в задачах водородной энергетики и безопасности. Анализ режимов инициирования и распространения волн горения и детонации в газовзвесьях может быть использован как для создания двигателей нового поколения, работающих на основе детонационных циклов, так и для обеспечения безопасности в запыленных пространствах, таких как горные выработки шахтенных сооружений, помещения мукомольных заводов, зерновых хранилищ и др. Оценка эффективности процесса имплантации микрочастиц в подложку может быть использована для создания технических устройств обработки поверхностей материалов и создания композитных материалов. Результаты настоящей диссертационной работы получены путем численного решения детализированных математических моделей описывающих процессы горения горючих смесей, состоящих из химически активных газов с примесями нейтральных микрочастиц. Модель

газовой фазы учитывает вязкость, сжимаемость, теплопроводность, многокомпонентную диффузию, конвективный перенос и энерговыделение за счет химического превращения. Для описания динамики инертных взвешенных микрочастиц использовалась двухтемпературная двухскоростная континуальная модель сплошной среды или приближение Стокса переноса невзаимодействующих частиц в газовом потоке.

### **Цель диссертационной работы**

Целью работы является выполняемое методами численного моделирования исследование физических механизмов формирования нестационарных и переходных режимов распространения волн горения и детонации в газовых смесях различного состава, в том числе и с содержанием мелкодисперсных инертных частиц (газовзвесьях). Для достижения целей исследований был разработан эффективный вычислительный программный комплекс компьютерного моделирования процессов горения с использованием многопроцессорных кластерных вычислительных систем, выполнена программная реализация и адаптация современного бездиссипативного вычислительного метода КАБАРЕ для решения задач газодинамики горения и детонации и проведен ряд вычислительных экспериментов по распространению волн горения внутри ограниченных объемов содержащих горючую газовую смесь или газовзвесь при различных начальных условиях в одномерной, двухмерной и трехмерной геометриях расчетной области. Были выполнены постановки и проанализированы результаты следующих компьютерных экспериментов:

1. Трехмерное и двухмерное детальное моделирование распространения волны горения стехиометрической водород-кислородной смеси от закрытого торца полуоткрытого канала с переходом от дефлаграционного горения к детонации.
2. Моделирование распространения и эволюции очага горения под действием гравитационного поля в бедной водород-воздушной смеси близкой к нижнему концентрационному пределу воспламенения.

3. Моделирование процесса возбуждения детонации в газовзвесьях с неоднородным распределением инертных микрочастиц путем их лучистого нагрева от внешнего источника.
4. Моделирование переноса инертных микрочастиц в потоке за детонационной волной для задач имплантации.

#### **Научная новизна работы.**

1. Впервые анализ процесса ускорения пламени и перехода к детонации методами численного моделирования был выполнен в трехмерной постановке с учетом детальных механизмов химической кинетики, что позволило уточнить детали механизма перехода к детонации, ранее исследованного только в двухмерной геометрии.
2. Получена более полная, по сравнению с приводимой ранее в литературе, детализация процесса эволюции очага пламени вблизи нижнего концентрационного предела горения, выполненная на основе детального моделирования горения в замкнутых объемах, заполненных низкоактивными горючими смесями.
3. Показана принципиальная возможность инициирования направленной детонационной волны в газовой смеси путем лучистого нагрева взвешенных химически нейтральных микрочастиц.
4. Впервые методами математического моделирования воспроизведен процесс имплантации частиц на подложку в импульсе детонационной волны и получены оптимальные соотношения между характеристиками потока частиц и расположением подложки.
5. Бездиссипативный балансно-характеристический метод КАБАРЕ был впервые адаптирован для решения задач распространения волн горения в химически активных газовых смесях.

#### **Научная и практическая ценность работы.**

Компьютерное моделирование трёхмерных процессов горения и детонации позволяет отрабатывать и уточнять методы и трактовку результатов диагностики этих процессов в лабораторных экспериментах. Проведённый анализ

особенностей горения бедных водородно-воздушных смесей позволил выделить и детализировать конвективный механизм переноса очагов возгорания, что даёт дополнительный материал, необходимый для оценки возникновения и развития пожара в реакторном зале при тяжёлых авариях на АЭС. Полученные результаты и модели горения газозвесей позволяют оценить качественное и количественное влияние микрочастиц на развитие процессов горения горючей смеси и определить вклад теплового излучения в физические механизмы возгорания и инициирования детонации в газозвесах, что может быть использовано в научных и прикладных исследованиях физики горения и взрыва дисперсных горючих газовых сред и топлив. Конкретные результаты могут быть использованы при создании ряда перспективных технических систем таких как двигатели внутреннего сгорания нового поколения, эффективные системы имплантации и напыления микрочастиц, системы пожаро- и взрывобезопасности водородных энергетических установок и АЭС.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Полученное на основе детального трехмерного моделирования подтверждение ламинарной природы газодинамического течения в процессе ускорения пламени и перехода в детонацию в высоко химически активных газовых смесях.
2. Подтверждение справедливости теории ускорения пламени и перехода к детонации, основанной ранее на результатах двухмерных расчётов горения высоко химически активных газовых смесей, путём компьютерного моделирования развития данных процессов в трехмерных полукрытых каналах реального масштаба заполненных стехиометрической водород-кислородной смесью.
3. Детальное описание сценария развития горения в бедных водород-воздушных смесях близких по составу к концентрационному пределу воспламенения, содержащихся в замкнутом объеме.
4. Обнаруженный методами численного моделирования механизм локализованного инициирования детонации газообразной горючей смеси пу-

тем лучистого нагрева слоя взвешенных в газе химически нейтральных микрочастиц.

5. Результаты анализа моделирования динамики микрочастиц в потоке за фронтом детонационной волны и концепция повышения эффективности детонационно-индуцированной имплантации микрочастиц путем профилирования подложки или изменения ее ориентации по отношению к потоку.
6. Оценка эффективности бездиссипативного метода КАБАРЕ для повышения точности решения задач горения и детонации газовых смесей

#### **Достоверность результатов.**

В основу физических моделей и математических алгоритмов использованных для проведения исследований положены общепринятые на данный момент методики описания фундаментальных законов горения газообразных и дисперсных сред. Для проверки корректности получаемых результатов было проведено всестороннее тестирование компьютерных кодов реализующих выбранную физико-математическую модель процессов горения. Полученные результаты хорошо согласуются с теоретическими представлениями и экспериментальными данными о параметрах ламинарного пламени, детонационных волн и динамике переходных режимов. Используемые численные методы для решения уравнений газовой динамики показали хорошее совпадение в области сходимости на тестовых задачах распространения волн горения и детонации с результатами, полученными с использованием более современного бездиссипативного метода КАБАРЕ.

#### **Апробация работы.**

Основные положения и результаты работы докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях: Всероссийская научная школа молодых ученых Волны и вихри в сложных средах (Москва, 2012), VII Всероссийская конференция Необратимые процессы в природе и технике (Москва 2013), XXV Конференция “Современная химическая физика” (Туапсе 2013), XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной ме-

ханики (Казань, 2015), Всероссийская научно-техническая конференция Авиадвигатели XXI века (Москва 2015), Третья Международная конференция по горению и детонации “Мемориал Я.Б. Зельдовича” (Москва 2014), VI European Combustion Meeting (Лунд, Швеция 2013), 24th International colloquium on the dynamics of explosions and reactive systems (Тайбей, Тайвань 2013), XXVIII, XXX International conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Эльбрус, 2013, 2015), XXIX International conference on Equations of State for Matter (Эльбрус, 2014, 2016), 8th International Seminar on Flame Structure (Берлин, 2014), 6th International symposium on non-equilibrium processes, plasma, combustion and atmospheric phenomena (Сочи 2014), 25th International colloquium on the dynamics of explosions and reactive systems (Лидс, Великобритания, 2015).

#### **Личный вклад.**

Автором разработаны подходы к программной реализации многомерно-го численного моделирования процессов распространения волн горения и детонации в газовых смесях и газозвесах на кластерных многопроцессорных и многоядерных системах, проведена большая часть вычислительных экспериментов. Он принимал непосредственное участие в тестировании использованных компьютерных кодов, проводил модернизацию и усовершенствование вычислительного комплекса в соответствии с современными подходами разработки программного обеспечения, внедрял новые физические модели и математические алгоритмы. Принимал активное участие в анализе и интерпретации полученных результатов расчетов, а также в формулировке и обосновании моделей и выводов, вошедших в диссертацию.

**Публикации.** Основные результаты по теме диссертации изложены в 32 печатных изданиях 10 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 22 — в тезисах докладов.

**Публикации в журналах из перечня ВАК**

- I. Hydrogen-oxygen flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in three-dimensional rectangular channels with no-slip walls / M. F. Ivanov, A. D. Kiverin, I. S. Yakovenko, M. A. Liberman // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2013. — Vol. 38, no. 36. — Pp. 16427–16440.
- II. О детонационно-индуцированной имплантации микрочастиц в подложку / В. В. Голуб, М. Ф. Иванов, А. Д. Киверин, И. С. Яковенко // *Письма ЖТФ*. — 2014. — Т. 40, № 20. — С. 88–95.
- III. *Ivanov M. F., Kiverin A. D., Yakovenko I. S.* The role of compression waves in flame acceleration and transition to detonation inside confined volumes // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2015. — Vol. 653. — P. 012062.
- IV. Direct initiation of gaseous detonation via radiative heating of microparticles volumetrically suspended in the gas / V. P. Efremov, M. F. Ivanov, A. D. Kiverin, I. Yakovenko // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2015. — Vol. 653. — P. 012063.
- V. *Kiverin A. D., Yakovenko I. S.* Modes of choked flame instability defined by the peculiarities of combustion kinetics at rising pressure // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2015. — Vol. 653. — P. 012061.
- VI. *Иванов М. Ф., Киверин А. Д., Яковенко И. С.* Влияние газодинамических процессов на развитие горения вблизи концентрационных пределов воспламенения // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана*. — 2015. — Т. 6. — С. 85–98.
- VII. Объемное инициирование газовой детонации путем лучистого нагрева взвешенных в газе микрочастиц / В. П. Ефремов, М. Ф. Иванов, А. Д. Киверин, И. С. Яковенко // *Письма ЖТФ*. — 2016. — Т. 42, № 4. — С. 52–59.

- VIII. Mechanisms of direct detonation initiation via thermal explosion of radiatively heated gas-particles layer / V. P. Efremov, M. F. Ivanov, A. D. Kiverin, I. S. Yakovenko // *Results in Physics*. — 2015. — Vol. 5. — Pp. 290–296.
- IX. Application of dissipation-free numerical method CABARET for solving gas-dynamics of combustion and detonation / M. Ivanov, A. D. Kiverin, S. G. Pinevich, I. S. Yakovenko // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2016. — Vol. 754. — P. 102003.
- X. Role of numerical scheme choice on the results of mathematical modeling of combustion and detonation / I. Yakovenko, A. D. Kiverin, S. G. Pinevich, M. F. Ivanov // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2016. — Vol. 774. — P. 012093.

**Статьи, опубликованные в сборниках материалов и тезисов научных конференций**

1. *Киверин А. Д., Яковенко И. С.* Механизм ускорения пламени и переход горения в детонацию в канале прямоугольного сечения // *Волны и вихри в сложных средах: Всероссийская научная школа молодых ученых : 3-5 декабря 2012 г., Москва: Тезисы докладов.* — М.:МАКС Пресс, 2012. — С. 117.
2. *Яковенко И. С.* Исследование задач трехмерной газодинамики на примере задачи о дифракции ударной волны на трехмерном уступе // *Молодежный научно-технический вестник.* — М.: ФГБОУ ВПО “МГТУ им. Н.Э. Баумана”, 2012.
3. *Иванов М. Ф., Киверин А. Д., Яковенко И. С.* Механизм ускорения пламени и переход горения в детонацию в канале прямоугольного сечения // *Необратимые процессы в природе и технике: Труды Седьмой Всероссийской*

- конференции : 29-31 января 2013г. (В трех частях) Ч. II. — М.: МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2013. — С. 38.
4. *Яковенко И. С.* Численное моделирование процессов горения в открытых каналах // Необратимые процессы в природе и технике: Труды Седьмой Всероссийской конференции : 29-31 января 2013г. (В трех частях) Ч. II. — М.: МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2013. — С. 123.
  5. *Яковенко И. С.* Численное моделирование процессов горения в трехмерных каналах // Молодежный научно-технический вестник. — М.: ФГБОУ ВПО “МГТУ им. Н.Э. Баумана”, 2013.
  6. Three-dimensional modeling of flame acceleration and deflagration to detonation transition in rectangular channel / I. Yakovenko, A. Kiverin, M. Ivanov, M. Liberman // Proceedings of: “6th European combustion meeting” (ECM 2013) : 25-28 June, Lund, Sweden. — 2013.
  7. Flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in three-dimensional rectangular channel / M. F. Ivanov, A. D. Kiverin, M. A. Liberman, I. S. Yakovenko // Proceedings of: “24th International colloquium on the dynamics of explosions and reactive systems” (ICDERS 2013) : 28 Jul. - 2 Aug., Taipei, Taiwan. — 2013.
  8. Role of spatial factor on flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in rectangular channel / M. F. Ivanov, A. D. Kiverin, M. A. Liberman, I. S. Yakovenko // Proceedings of: “Physics of Extreme States of Matter - 2013” : 1-6 March, Elbrus, Russia / ed. by V. E. Fortov [et al.]. — М.:Granica, 2013. — P. 98.
  9. *Иванов М. Ф., Киверин А. Д., Яковенко И. С.* Самоподдерживаемый режим ускорения пламени в канале и механизм формирования детонации // Инженерный журнал: наука и инновации. — 2013. — Т. 8, № 20. — С. 19.

10. *Иванов М. Ф., Киверин А. Д., Яковенко И. С.* Режим ускорения пламени и механизм формирования детонации в каналах // Сборник тезисов докладов 25ой конференции "Современная химическая физика" : 20 Сент. - 1 Окт., Туапсе, Россия. — 2013. — С. 68—69.
11. Three-dimensional flow structures induced by the accelerating flames in channels / M. F. Ivanov, A. D. Kiverin, M. Liberman, I. Yakovenko // Proceedings of: "Physics of Extreme States of Matter - 2014" : 1-6 March, Elbrus, Russia / ed. by V. E. Fortov [et al.]. — M.:Granica, 2014. — P. 78.
12. *Kiverin A., Yakovenko I., Ivanov M.* The role of compression waves in confined flame evolution // Proceedings of: "8th International Seminar on Flame Structure" : 21-24 September, Berlin, Germany. — 2014.
13. *Kiverin A., Yakovenko I., Ivanov M.* The role of compression waves in transient combustion regimes // Proceedings of: "Advances in nonequilibrium processes: plasma, combustion, and atmosphere" : 5-10 October, Sochi, Russia / ed. by A. Starik, S. Frolov. — M.:TORUS PRESS, 2014. — Pp. 247–255.
14. Mechanisms of detonation formation in the gaseous mixtures / A. Kiverin, M. Ivanov, M. Liberman, I. Yakovenko // Proceedings of: 3rd International Conference on Combustion and Detonation "Ya.B. Zel'dovich Memorial" : 27-31 October, Moscow, Russia / ed. by A. Borisov, S. Frolov. — M.:TORUS PRESS, 2014. — Pp. 27–31.
15. *Kiverin A., Yakovenko I.* Modes of choked flame instability and transition to detonation defined by the peculiarities of combustion kinetics at rising pressure // Proceedings of: "25th International colloquium on the dynamics of explosions and reactive systems" (ICDERS 2015) : 2-7 August, Leeds, United Kingdom. — 2015.

16. *Яковенко И. С., Киверин А. Д.* Влияние волн сжатия на процесс ускорения пламени и переход от медленного горения к детонации в замкнутых объемах // Сборник докладов XI Всероссийского съезда по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики : 20-24 Августа, Казань, Россия / под ред. Д. А. Губайдуллин, А. М. Елизаров, Е. К. Липачёв. — Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2015. — С. 4309—4311.
17. *Kiverin A. D., Yakovenko I. S.* Modes of choked flame instability defined by the peculiarities of combustion kinetics at rising pressure // Book of abstracts of: "Interaction of intense energy fluxes with matter - 2015" : 1-6 March, Elbrus, Russia / ed. by V. E. Fortov [et al.]. — Nalchik: IPC KBGU, 2015. — P. 117.
18. *Yakovenko I. S., Kiverin A. D., Ivanov M. F.* Flames and detonations inside obstructed channels and gas-laden combustible mixtures // Book of abstracts of: "Interaction of intense energy fluxes with matter - 2015" : 1-6 March, Elbrus, Russia / ed. by V. E. Fortov [et al.]. — Nalchik: IPC KBGU, 2015. — P. 118.
19. *Иванов М. Ф., Киверин А. Д., Яковенко И. С.* О бесконтактном методе прямого инициирования детонации в газообразных смесях с распределенными микрочастицами // Сборник тезисов докладов научно-технической конференции "Авиадвигатели XXI века" : 24-27 Ноября, Москва, Россия. — М:ЦИАМ, 2015. — С. 344—345.
20. *Киверин А. Д., Яковенко И. С., Иванов М. Ф.* Сверхзвуковое и детонационноподобное горение в канале: структура, устойчивость и термодинамическая эффективность // Сборник тезисов докладов научно-технической конференции "Авиадвигатели XXI века" : 24-27 Ноября, Москва, Россия. — М:ЦИАМ, 2015. — С. 345—346.
21. Peculiarities of numerical analysis of unsteady reactive flows / I. S. Yakovenko, A. D. Kiverin, M. F. Ivanov, S. G. Pinevich // Book of abstracts

of: "Equations of state for matter - 2016" : 1-6 March, Elbrus, Russia / ed. by V. E. Fortov [et al.]. — Nalchik: IPC KBGU, 2016. — P. 201.

22. *Kiverin A. D., Yakovenko I. S.* On the exothermal reaction kernel formation in shock tube // Book of abstracts of: "Equations of state for matter - 2016" : 1-6 March, Elbrus, Russia / ed. by V. E. Fortov [et al.]. — Nalchik: IPC KBGU, 2016. — P. 200.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 135 страниц, включая 34 рисунка и 3 таблицы. Список литературы содержит 151 наименование.

## **Глава 1. Литературный обзор и выбор математической модели динамики реагирующих газовых потоков и газозвесей**

В первой главе приведен очерк из истории развития науки о горении и взрыве, отмечены фундаментальные исследования, оказавшие наибольшее влияние на становление физики горения и детонации газовых смесей и газозвесей. Дан краткий литературный обзор современных работ посвященных теоретическим и экспериментальным исследованиям, а также математическому моделированию процессов горения и детонации газовых смесей и газозвесей. Описана терминология, используемая в специальной научно-технической литературе посвященной тематике данной диссертационной работы. С учётом результатов проведённого аналитического обзора рассмотрена математическая модель динамики реагирующих газов и газозвесей, используемая в исследованиях, представленных в диссертации.

### **1.1 Горение и детонация газов и дисперсных сред**

Человек сталкивался с различными проявлениями процессов горения и взрыва на протяжении всей своей истории. Во многом именно умение использовать огонь для своих нужд обеспечило выживание человека на заре его существования. По мере дальнейшего развития общества процессы горения стали и остаются основным источником получения энергии, необходимой для существования практически всех отраслей промышленности, обеспечивающих научно-технический и социальный прогресс человечества. Благодаря этому, явлениям горения и взрыва всегда уделялся повышенный интерес со стороны научного сообщества.

Заметный прогресс в области физики горения газообразных топлив стал возможен в начале XVIII века благодаря фундаментальным исследованиям в об-

ласти химии. История исследований горючих газовых смесей берет свое начало с изучения водорода, одного из самых легко воспламеняемых газов. Впервые в ходе реакции серной кислоты и железа водород удалось синтезировать Теофрасту Парацельсу в XV веке [1], однако горение водорода впервые было продемонстрировано только в 1700-х годах французским химиком Николя Лемери. Дальнейшее детальное исследование водорода провел Генри Кавендиш [2; 3], в результате которого он нашел несколько способов получения водорода, и показал, что сам по себе водород не поддерживает горения, а воспламеняемой является только предварительно перемешанная смесь водорода с воздухом, при этом продуктом сгорания водород-воздушной смеси является чистая вода. Современное название водороду дал Лавуазье (“hydrogen”, от греческого hydro – “вода” и genes – “создатель”).

Круг задач научного и прикладного характера, решение которых требовало тщательного исследования как химических, так и физических процессов сопутствующих горению газообразных смесей и газовзвесей сформировался в XVIII - XIX веках. Одним из основных мотивов к интенсивному исследованию процессов горения стали вопросы безопасности в горнодобывающей, химической и пищевой промышленности. Первые детальные исследования причин аварий в шахтах были выполнены Хэмфри Дэви [4], в ходе которых он показал, что “рудничным газом”, взрыв которого приводит к аварии, является метан, оценил скорость распространения пламени смеси метана с воздухом в закрытом канале, а также обнаружил существование критического диаметра канала, при котором распространение пламени становится невозможным.

На практике при аварийных ситуациях горючие газовые смеси, как правило, содержат примеси мелкодисперсных взвешенных частиц таких, как, к примеру, угольная или мучная пыль. Как показали дальнейшие исследования, наличие взвешенных частиц в горючей смеси газов оказывает значительный промотирующий эффект на процесс горения [5], или является непосредственным источником энерговыделения в случае низкой химической активности несущей газовой фазы (так называемый пылевой взрыв) [6]. Острые вопросы, связанные с промыш-

ленной безопасностью возникшие во второй половине XIX века, вынудили правительства Франции, Англии, Германии и США впервые создать специальные комиссии для расследования причин аварий на производстве, развивающихся в результате протекания неконтролируемых взрывных процессов [7]. С работой этих комиссий связаны дальнейшие успехи в области формирования основных представлений о физической природе горения газовых смесей и газозвесей. В рамках работы Французской комиссии по исследованию природы аварий в шахтах Бертло первым обнаружил высокие скорости распространения детонационных волн в трубках, значительно превышающие скорости дефлаграционного пламени. Он выдвинул гипотезу об ударно-волновом механизме распространения детонационных волн, которую подкрепил своими наблюдениями об ударно-волновой трансформации ацетилена на частицы углерода, взвешенные в водороде. Совместно с Вьелем Бертло удалось измерить скорости детонационной волны в различных смесях и обнаружить критические размеры трубок, в которых возможно формирование детонации. Параллельно Малляр и ЛеШателье с использованием хронографа Депре получают первые изображения движущегося детонационного фронта в газах. В последующих работах Малляр и ЛеШателье, используя вращающийся барабан с фотопленкой, получают серию снимков, позволяющих проследить развитие волн. Они выделили три основных стадии распространения пламени: этап низкой скорости распространения пламени – дефлаграция, промежуточный этап нестационарного ускорения пламени и следующий за ним этап быстрого распространения волны горения – детонация.

Первые попытки теоретического описания детонации в газах были предприняты независимо Дэвидом Леонардом Чепменом [8] и Эмилем Жуге [9]. Теория Чепмена-Жуге базируется на предположении Марселена Бертло об ударно-волновом механизме распространения детонационной волны и является простейшей одномерной теорией детонации, в рамках которой постулируется, что детонационная волна является комплексом из ударной волны и движущейся за ней зоны горения. Исходя из законов сохранения на фронте детонационной волны, Чепмен и Жуге получили оценки скорости распространения детонационной

волны в газовых смесях, которые находились в хорошем согласии с имеющимися на тот момент экспериментальными данными [10]. Однако правила отбора скорости стационарной детонации, которым пользовались в своей теории Чепмен и Жуге, нуждались в дальнейшем обосновании. На основе детального рассмотрения существующих на тот момент подходов к методам расчета скорости детонации, Яков Борисович Зельдович проводит детальное обоснование правила отбора Чепмена – Жуге и ударно-волнового механизма распространения детонационных волн, и строит новую теорию детонации, отвечающую современным представлениям о скоростях химических превращений инициированных ударным сжатием газовой смеси [11]. Не зависимо от него аналогичную физическую модель детонационных волн разработали Джон фон Нейман и Вернер Дёринг [12; 13]. Впоследствии новая модель детонации была названа по их именам моделью Зельдовича-Неймана-Дёринга или сокращенно ЗНД. В отличие от модели Чепмена-Жуге, где химические превращения происходят непосредственно за падающей ударной волной, в рамках модели ЗНД предсказывается наличие конечного промежутка между фронтом ударной волны и фронтом реакции, называемого зоной индукции. В дальнейшем были получены прямые экспериментальные доказательства структуры детонации предсказанной теорией ЗНД [14; 15].

Исходя из современных представлений о явлениях горения и взрыва в газовых смесях, детонационные и дефлаграционные волны являются двумя различными типами волн горения, которые распространяются в предварительно перемешанных смесях практически равномерно, и имеют при этом различные скорости [16]. Термином дефлаграция (от лат. "deflagrare" – сгорать) обозначают режим медленного, дозвукового распространения пламени, основными механизмами распространения которого являются перенос тепла из зоны реакции, так называемого фронта пламени, к свежей смеси за счет молекулярной теплопроводности, а также диффузионный поток молекул компонент свежей смеси в зону реакции. Под детонацией (от лат. "detonare" – греметь, грохотать) понимают режим быстрого горения, при котором скорость распространения фрон-

та пламени относительно свежей смеси превышает скорость звука в продуктах горения. Структура детонационной волны представляет собой самоподдерживающийся комплекс из ударной волны и следующего за ней фронта пламени, при этом механизм распространения детонации заключается в адиабатическом ударно-волновом сжатии смеси с последующим сгоранием во фронте реакции, в ходе которого высвобождается энергия достаточная для поддержания ведущей ударной волны.

Теория дефлаграционного горения развивалась параллельно с теорией детонации. Предположение о тепловом характере распространения волн дефлаграции впервые сделали Малляр и ЛеШателье. Первые попытки разработать качественную теорию дефлаграционного горения были предприняты Нюссельтом, Даниэлом, Жуге и Круссардом, Люисом и Эльбэ [17; 18]. Современная качественная теория стационарного дефлаграционного горения, учитывающая влияние теплопроводности и диффузии на распространение волны горения в газах, дана в совместной работе Я.Б. Зельдовича и Франк-Каменецкого [19]. Дальнейшее развитие физики горения и взрыва акцентировано на исследовании сложных нестационарных и переходных процессов горения, включающих в себя формирование критических околосвуковых и сверхзвуковых режимов распространения волн горения. Важнейшие результаты в этой области были получены в классических экспериментальных исследованиях Г.Д. Саламандры [20], Т. Оппенгейма [21–23] и Д. Ли [24; 25].

## **1.2 Нестационарные и переходные режимы горения**

Появление надежных качественных теорий стационарных процессов дефлаграции и детонации стало важным этапом развития физики горения и взрыва, позволило теоретически обосновать большое количество экспериментальных данных и создать фундамент для дальнейших исследований. Уже из эксперимен-

тов Малляра и ЛеШателье было известно, что динамика волны горения непосредственно после воспламенения носит характер нестационарного ускорения пламени и проходит через несколько этапов развития вплоть до формирования детонации. С появлением в середине XX века более совершенных методов высокоскоростной шпирен съемки и теневой фотографии [26], было показано, что фронт волны горения по мере своего распространения в камерах сгорания технологических систем и экспериментальных стендов подвержен многочисленным неустойчивостям, а газодинамические потоки сопровождающие процесс горения нередко имеют турбулентную структуру. Развитие неустойчивостей на фронте волны горения приводит к возникновению принципиально трехмерных эффектов, которые не могут быть описаны в рамках одномерных приближений структуры детонации ЗНД или стационарной волны ламинарной дефлаграции. Процесс распространения пламени зачастую носит ярко выраженный нестационарный характер и может быть представлен как последовательность сменяющих друг друга переходных режимов.

Одним из наиболее сложных и принципиальных вопросов физики горения и взрыва, на сегодняшний день, является выявление ведущих физических механизмов и построение качественных и количественных теорий описывающих процессы нестационарного развития волн горения в замкнутых объемах, заполненных горючими смесями и газовзвесьями. Разработка надежных критериев реализации тех или иных режимов распространения волн горения, на основе этих моделей, необходима для решения широкого круга задач промышленности и энергетики. Наряду с уже известными, и до сих пор актуальными, вопросами обеспечения безопасности энергетики, химической и горнодобывающей промышленности [27], непрерывно появляются все новые вызовы. Детальные исследования развития волн горения в водород-воздушных смесях вблизи концентрационного предела горения необходимы для обеспечения безопасности атомных электростанций, где возможны сценарии аварий, в рамках которых происходит быстрое сгорание водорода образованного в результате химической реакции воды и циркониевых тепловыделяющих элементов [28; 29]. Исследования

процессов инициирования детонации в газовых смесях востребованы в области разработки новейших детонационных двигателей [30], обладающих большей эффективностью по сравнению с классическими двигателями внутреннего сгорания. Одной из главных задач отрасли альтернативной энергетики, в частности энергетических систем на основе высоко активных водородосодержащих топлив, также является обеспечение безопасности эксплуатации, хранения и транспортировки топлив, решение которой невозможно без исследований пределов воспламенения и условий формирования тех или иных режимов горения рассматриваемых топлив внутри камер сгорания или топливных баков заданной геометрии.

Несмотря на неизменно растущую актуальность, вопросы физики горения и взрыва связанные с развитием нестационарных процессов горения долгое время оставались малоизученными. Построение аналитических теорий нестационарных процессов горения оказалось затруднено ввиду очень большого числа факторов и явлений, оказывающих значительное влияние на развитие волн горения, причём само это развитие является сложным сугубо нелинейным процессом. Прогресс в области методик визуализации и измерения параметров газодинамических потоков позволил получить большое количество данных по горению газовых смесей и газовзвесей различной концентрации, заполняющих камеры сгорания различных геометрических конфигураций и содержащихся при различных начальных условиях. Однако полученные данные не всегда имеют достаточное пространственно-временное разрешение, необходимое для исследования наиболее быстрых процессов горения, таких как, например, формирование детонации в замкнутых объемах, и не позволяют исследовать трехмерную структуру газодинамических потоков, характерную для распространяющихся волн горения. Указанные недостатки в значительной степени затрудняют детальный анализ и корректную интерпретацию данных, полученных из эксперимента.

Успехи, достигнутые в физике нестационарно развивающихся пламен в последние несколько десятков лет, связаны с разработкой вычислительных машин, достаточно мощных для проведения численного анализа задач горения и детона-

ции газовых смесей и газозвесей. Ввиду большого количества определяющих факторов и процессов, моделирование распространения волн горения является одним из наиболее ресурсоемких в вычислительной физике и требует максимально эффективного использования вычислительных мощностей. В ранних исследованиях с применением методов математического моделирования намеренно вводились упрощающие предположения, которые снижали ресурсоемкость задач, но не всегда были обоснованы с физической точки зрения. Основным фактором, определяющим высокую вычислительную стоимость моделирования процессов горения, является необходимость численного решения в каждой расчетной ячейке системы уравнений газовой динамики сопряженной с системой дифференциальных уравнений, описывающих процессы химических превращений. При этом, так как характерный размер расчетной ячейки для проведения корректных расчётов не должен превосходить ширины зоны реакции, которая составляет порядка 0.1 мм для смесей на основе водорода, для моделирования реальных многомерных камер сгорания технических систем и экспериментальных стендов может потребоваться число расчетных ячеек, превышающее десятки и сотни миллионов. Этим объясняется тот факт, что в ранних работах по численному моделированию с использованием методов численного моделирования процессов горения исследователи часто прибегали к использованию упрощенных кинетических механизмов реакции топливных смесей [31; 32], или намеренному искажению физико-химических коэффициентов с целью искусственного увеличения ширины фронта пламени [33–35]. Несмотря на введение описанных предположений, авторами работ был получен ряд важных качественных результатов по формированию газодинамического потока при движении нестационарного фронта пламени, исследованию взаимодействий между фронтом пламени и ударными волнами, влиянию гидравлического сопротивления на распространение волны горения в узких каналах. С увеличением производительности вычислительных систем, разработкой мощнейших кластерных вычислительных комплексов, созданием эффективных математических алгоритмов, стала возможной реализация методов прямого математического моделирования процессов горе-

ния и детонации, учитывающего весь спектр явлений сопутствующих эволюции и распространению волн горения в многомерных камерах сгорания различной геометрии. Сегодня математическое моделирование горения в совокупности с результатами натурных экспериментов является наиболее мощным инструментом для построения теоретических моделей распространения нестационарных волн горения.

### **1.3 Математическая модель динамики реагирующих газовых потоков и газозвесей**

В данной диссертационной работе развивается подход к численному моделированию реальных горючих смесей с учетом детальных механизмов химической кинетики, разработанный в рамках публикаций [36–38]. Использование суперкомпьютерных вычислительных комплексов Межведомственного Вычислительного Центра Российской Академии Наук и Вычислительного Центра Московского Государственного Университета имени Ломоносова позволило обобщить математическую модель использованную авторами [36–38] для решения задач горения в трехмерной геометрии с использованием расширенной модели химической кинетики окисления водород-кислородной смеси. Для задач инициирования детонации в облаке взвешенных частиц в горючей смеси математическая модель была дополнена учетом межфазного взаимодействия в рамках двухскоростной двухтемпературной континуальной модели и нагрева частиц излучением от внешнего источника в диффузионном приближении. При решении задач детонационной имплантации была применена модель Стокса для переноса невзаимодействующих частиц в несущем газовом потоке.

### 1.3.1 Трехмерная модель газовой динамики реагирующих потоков

Отправной точкой для математического описания сплошной среды является построение корректной математической модели, включающей в себя описание ведущих физических процессов, оказывающих наибольшее влияние на динамику рассматриваемого явления. Математическая модель для описания процессов нестационарного распространения волн горения в газовых смесях должна учитывать эффекты вязкости, сжимаемости, теплопроводности, молекулярной диффузии, энерговыделения за счет химических реакций. Ввиду интенсивного энерговыделения и химических превращений, наличия волн сжатия и ударных волн необходимо также брать в расчет возможные значительные изменения термодинамических параметров среды и коэффициентов переноса.

Полная система уравнений описывающих динамику трехмерных потоков горючей газовой смеси в эйлеровых координатах, выводится из законов сохранения массы, импульса и энергии, дополненных реальными уравнениями состояния среды, с учетом сжимаемости, многокомпонентной диффузии, теплопроводности, вязкости, химических превращений и энерговыделения, и может быть записана в следующем дивергентном виде [39; 40]:

Закон сохранения массы:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (1.1)$$

Закон сохранения масс отдельных компонент смеси:

$$\frac{\partial (\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i Y_k)}{\partial x_i} = \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D_k(T) \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) \right] + \left( \frac{\partial Y_k}{\partial t} \right)_{chem} \quad (1.2)$$

Закон сохранения импульса:

$$\frac{\partial (\rho u_j)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_i} = \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} (\sigma_{ji} - \delta_{ij} p) \right] \quad (1.3)$$

Закон сохранения полной энергии:

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i E)}{\partial x_i} = \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} (u_j \sigma_{ji} - u_i p) \right] + \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \kappa(T) \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \sum_k h_k \left( \frac{\partial Y_k}{\partial t} \right) \right] \quad (1.4)$$

Уравнения состояния многокомпонентной газовой смеси:

$$p = RTn = RT \sum_k Y_k \quad (1.5)$$

$$\varepsilon = c_V T / \rho \quad (1.6)$$

Вычисление компонент тензора вязких напряжений:

$$\sigma_{ij} = \mu(T) \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_m}{\partial x_m} \right) \quad (1.7)$$

где  $x_1, x_2, x_3$  – пространственные координаты,  $t$  – время,  $\rho$  – плотность,  $Y_k = \rho_k / m_k$  – молярная плотность  $k$ -й компоненты смеси,  $m_k$  – молярная масса  $k$ -й компоненты смеси,  $p$  – давление,  $u_x, u_y, u_z$  – компоненты вектора массовой скорости потока,  $E = \varepsilon + \frac{1}{2} (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)$  – удельная полная энергия смеси,  $\varepsilon$  – удельная внутренняя энергия смеси,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $n = \sum_k Y_k$  – молярная плотность смеси,  $c_V = \sum_k c_{V_k} Y_k$  – объемная удельная теплоемкость смеси при постоянном объеме,  $c_{V_k}$  – молярная удельная теплоемкость  $k$ -й компоненты смеси при постоянном объеме,  $\kappa(T)$  – коэффициент теплопроводности,  $D_k(T)$  – коэффициент диффузии,  $\mu(T)$  – коэффициент вязкости,  $h_k$  – молярная энтальпия образования  $k$ -й компоненты смеси.

Расчет молярных удельных теплоемкостей и молярных энтальпий образования каждой из компонент смеси по ходу решения выполнялся путем интерполирования данных теплофизических таблиц NIST JANAF полиномами пятого порядка [41; 42].

### 1.3.2 Вычисление коэффициентов переноса

Коэффициенты переноса вычислялись из первых принципов молекулярно-кинетической теории газов, исходя из следующих соотношений [42; 43]:

Коэффициент вязкости  $k$ -й компоненты смеси:

$$\mu_k(T) = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi m_k k_B T}}{\pi \sigma_k^2 \Omega^{(2,2)}} \quad (1.8)$$

Коэффициент вязкости смеси:

$$\mu(T) = \frac{1}{2} \left[ \sum_k \alpha_k \mu_k + \left( \sum_k \frac{\alpha_k}{\mu_k} \right)^{-1} \right] \quad (1.9)$$

Здесь  $\alpha_k = Y_k/n$  – мольная доля  $k$ -й компоненты,  $\Omega^{(2,2)}$  – приведенный интеграл столкновений, рассчитываемый для потенциала Леннарда-Джонса с учетом зависимости от приведенной температуры  $T^* = k_B T / \varepsilon_k$  [44],  $\sigma_k$  – эффективное сечение взаимодействия,  $\varepsilon_k$  – глубина потенциальной ямы,  $m_k$  – молекулярная масса  $k$ -й компоненты,  $k_B$  – константа Больцмана.

Коэффициент теплопроводности  $k$ -й компоненты смеси:

$$\kappa_k(T) = \frac{\mu_k c_{p_k}(T)}{\text{Pr}} \quad (1.10)$$

Коэффициент теплопроводности смеси:

$$\kappa(T) = \frac{1}{2} \left[ \sum_k \alpha_k \kappa_k + \left( \sum_k \frac{\alpha_k}{\kappa_k} \right)^{-1} \right] \quad (1.11)$$

Здесь  $\text{Pr}$  – число Прандтля, которое для газовых смесей составляет  $\text{Pr} \approx 0.71 \div 0.75$ .

Бинарный коэффициент диффузии для  $k$ -й и  $n$ -й компонент смеси:

$$D_{kn} = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{2\pi k_B^3 T^3 / m_{kn}}}{p \pi \sigma_{kn}^2 \Omega^{(1,1)}} \quad (1.12)$$

Коэффициент диффузии для  $k$ -й компоненты в смеси газов:

$$D_k = \frac{1 - X_k}{\sum_{n \neq k}^K \alpha_n / D_{nk}} \quad (1.13)$$

Здесь  $m_{kn} = \frac{m_k m_n}{m_k + m_n}$  – приведенная молекулярная масса для  $k$ -й и  $n$ -й компонент,  $\sigma_{kn} = 0.5 (\sigma_k + \sigma_n)$  – приведенное эффективное сечение взаимодействия для  $k$ -й и  $n$ -й компонент,  $\Omega^{(1,1)}$  – аналог  $\Omega^{(2,2)}$ , также зависящий от приведенной температуры [44].

В данной модели эффекты термодиффузии Соре, диффузионной теплопроводности Дюфура, самодиффузии и объемной вязкости считаются пренебрежимо малыми.

### 1.3.3 Механизм химической кинетики

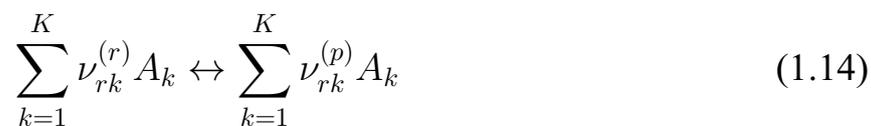
С учетом эффективного использования высоких мощностей современных вычислительных комплексов, становится возможным проводить прямое численное моделирование горения топлив на основе водорода и сложных углеводов, с использованием детальных кинетических механизмов содержащих сотни и даже тысячи элементарных реакций [45; 46]. Перспективные исследования в области использования векторных графических процессоров для поиска решений жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений [47; 48], описывающих химические превращения, позволят в будущем использовать детальные кинетические механизмы для крупномасштабного прямого численного моделирования реальных экспериментальных и технических систем. Однако, сегодня такой подход все еще не возможен. Для этих целей используются редуцированные механизмы химических реакций, в состав которых входят наиболее важные реакции, определяющие процесс химического превращения. Ввиду особой прикладной значимости и относительной простоты, наибольшее число редуцированных кинетических механизмов, из имеющихся на сегодня, разработано для описания процесса окисления водорода [39; 49–53]. Все они достаточно хорошо согласуются с накопленным объемом экспериментальных данных [54] и воспроизводят основные параметры горения смесей на основе водорода

да [55; 56], такие как время индукции, скорость распространения и структура ламинарного пламени в широком диапазоне начальных условий. Некоторое расхождение теоретических и экспериментальных данных в области бедных составов обусловлено погрешностью экспериментальных методик [57]. Как показывают последние исследования в области химической кинетики горения [57], для водород-воздушных смесей в области бедных составов допускается относительная погрешность 30% при определении значений скорости ламинарного пламени.

В отличие от одноступенчатых механизмов химической кинетики, редуцированные модели отражают важные свойства реальной химической кинетики смеси. Так для реальных химических реакций характерно наличие задержки воспламенения, которая объясняется существованием эндотермических реакций накопления радикалов. В случае одноступенчатой модели экзотермическая реакция начинается при любой начальной температуре. Также особенностью реальной кинетики является возможность смены доминирующего механизма окисления горючего. Для водород-кислородной смеси, например, при повышении температуры или давления водород-кислородной смеси вместо медленно протекающих реакций доминирующих при низких температурах и давлениях основную роль начинают играть реакции распространения и разветвления цепей с последующим гомогенным обрывом.

Результаты данной работы были получены с использованием кинетических схем [39] и [49], состоящих соответственно из 19 и 9 элементарных реакций для восьми химических элементов: **H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H, O, OH, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, и HO<sub>2</sub>**.

В общем случае, кинетический механизм, состоящий из нескольких обратимых элементарных реакций представленных в виде:



математически описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений относительно молярных плотностей отдельных компонент  $Y_i$  [39], как правило жесткой, вследствие резко различающихся времен протекания отдель-

ных реакций [58]:

$$\left(\frac{\partial Y_k}{\partial t}\right)_{chem} = \sum_{r=1}^R \left( k_{rf}(T) \cdot \left( \nu_{rk}^{(p)} - \nu_{rk}^{(r)} \right) \prod_{s=1}^K Y_s^{\nu_{rs}^{(r)}} + \right. \\ \left. + k_{rb}(T) \cdot \left( \nu_{rk}^{(r)} - \nu_{rk}^{(p)} \right) \prod_{s=1}^K Y_s^{\nu_{rs}^{(p)}} \right) \quad (1.15)$$

Здесь  $R$  – число элементарных реакций,  $K$  – число компонент,  $k_{rf}(T)$ ,  $k_{rb}(T)$  – скорости протеканий  $r$ -й реакции в прямом и обратном направлениях,  $\nu_{rk}^{(p)}$ ,  $\nu_{rk}^{(r)}$  – стехиометрические коэффициенты  $k$ -й компоненты  $r$ -й реакции в продуктах и реагентах соответственно.

Зависимость скоростей реакции от температуры описывается законом Аррениуса:

$$k_r(T) = A_r T^{\beta_r} \exp\left(\frac{-E_r}{RT}\right) \quad (1.16)$$

где  $A_r$  – предэкспоненциальный множитель,  $\beta_r$  – температурный показатель степени,  $E_r$  – энергия активации. Эти три параметра считаются постоянными и определяются из физико-химических расчетов при разработке кинетического механизма.

### 1.3.4 Учет влияния дисперсной фазы

Присутствие мелкодисперсных примесных частиц, взвешенных в горючей газовой фазе, может оказывать значительное влияние на процессы распространения волн горения. Так, присутствие химически активных частиц в горючей газовой смеси может модифицировать пределы инициирования и скорость распространения детонации [59]. В случае высокоактивных частиц, взвешенных в высокоактивной газовой смеси, может наблюдаться формирование гибридной структуры детонации, представляющей собой комплекс из двух следующих друг за другом ударных волн [60]. Добавление мелкодисперсных инертных частиц в горючую газовую смесь в зависимости от их размера и объемной концентрации

может оказывать как подавляющее воздействие на распространение и формирование детонации в газозвеси [61; 62], так и промотировать распространение дефлаграционных волн и способствовать более стремительному переходу от медленного горения к детонации [59].

При наличии мелкодисперсных частиц, взвешенных в газовой фазе, математическое описание газозвеси может быть выполнено в рамках континуального приближения двухтемпературной двухскоростной модели течения двухфазной сплошной среды. Основными каналами взаимодействия между несущей газовой фазой и инертными частицами в этом случае являются обмен импульсом и энергией, как посредством теплопроводности, так и лучистого теплопереноса от горячих продуктов горения на поверхность частиц.

Влияние дисперсной фазы на газовую фазу учитывается добавлением следующих источниковых слагаемых в правых частях соответствующих законов сохранения:

Закон сохранения импульса:

$$F_j^u = -\frac{\rho^p}{\rho} F_j^{St} \quad (1.17)$$

Закон сохранения энергии:

$$F^E = -\frac{\rho^p}{\rho} (F_i^{St} \cdot u_i) - \frac{\rho^p}{\rho} c_p^p Q^{gp} \quad (1.18)$$

Перенос дисперсной фазы описывается следующей системой уравнений:

$$\frac{\partial N^p}{\partial t} + \frac{\partial (N^p u_i^p)}{\partial x_i} = 0 \quad (1.19)$$

$$\frac{\partial u_j^p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i^p u_j^p) = F_j^{St} \quad (1.20)$$

$$\frac{\partial T^p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (T^p u_i^p) = Q^{gp} - \frac{2\pi (r^p)^2 N^p}{c_p^p \rho_0^p} (4\sigma \cdot (T^p)^4 - q^{rad}) \quad (1.21)$$

Здесь  $\rho^p = m^p N^p$  – массовая плотность частиц,  $N^p$  – численная концентрация частиц,  $m^p$  – масса частиц,  $u_j^p$  – скорость частиц,  $Q^{gp} = (T - T^p) / \tau^{gp}$

– межфазный энергообмен,  $\tau^{gp} = 2(r^p)^2 c_p^p \rho_0^p / (3\kappa(T) \text{Nu}^P)$  – характерное время межфазного энергообмена,  $L_0 = (m_p / \rho_p)^{1/3}$  – среднее расстояние между соседними частицами,  $\text{Nu}^P$  – число Нюссельта,  $c_p^p$  – удельная теплопроводность материала частиц при постоянном объеме,  $T^p$  – температура частиц,  $r^p$  – радиус частицы,  $\rho_0^p$  – плотность материала частиц,  $\sigma$  – константа Стефана-Больцмана,  $q^{rad}$  – поток лучистой энергии от продуктов горения к взвешенным частицам. Число Нюссельта рассчитывалось в приближении ряда по числу Пекле [63]:  $\text{Nu}^P = 2 + \frac{1}{2}Pe + \dots$ . Для мелкодисперсных частиц, быстро релаксирующих в несущей газовой фазе, молекулярные процессы переноса тепла доминируют над конвективными и число Пекле можно считать малым. Руководствуясь этими соображениями, число Нюссельта выбиралось равным 2.

Сила сопротивления сферических частиц в несущем потоке определялась по закону Стокса:

$$F_i^{St} = \frac{1}{\tau^{St}} (u_i - u_i^p) \quad (1.22)$$

где  $\tau^{St} = m^p / 6\pi r^p \mu(T)$  – характерное время релаксации скорости частиц к скорости потока.

Неравновесный поток лучистой энергии вычислялся в рамках диффузионного приближения, являющегося точным в одномерных постановках, рассматриваемых в данной диссертации:

$$\frac{d}{dx_i} \left( \frac{1}{\chi} \frac{dq^{rad}}{dx_i} \right) = -3\chi \left( 4\sigma \cdot (T^p)^4 - q^{rad} \right) \quad (1.23)$$

где  $\chi = 1/l$  – коэффициент поглощения излучения,  $l = 1/\pi(r^p)^2 N^p$  – длина пробега излучения. Поток излучения от продуктов горения принимается равным потоку излучения черного тела  $q^{rad}(x = X_f) = \sigma T_b^4$  с температурой  $T_b$  приближенно равной температуре продуктов горения, которая составляет порядка 3000 К.

В случае рассмотрения интенсивных быстропротекающих процессов в газозвезях с малыми концентрациями взвешенных частиц, влиянием частиц на

поток несущей газовой фазы, а также взаимодействиями между частицами можно пренебречь. В этом случае динамика частиц описывалась в приближении Стокса, в рамках которого для каждой отдельной сферической частицы решается система уравнений механики твердого тела:

$$\frac{dr_i^p}{dt} = u_i^p \quad (1.24)$$

$$m^p \frac{du_i^p}{dt} = F_i^{St} + F_i^M + F_i^S + F_i^g \quad (1.25)$$

$$J_i^p \frac{d\omega_i^p}{dt} = l_i^p \quad (1.26)$$

Здесь  $F_i^{St}$  – сила Стокса 1.22,  $F_i^M = -\frac{4}{3}\pi r_p^3 \rho_g C_M \sum_{j,k=1}^3 \varepsilon_{ijk} (u_j - u_j^p) (\omega_k - \omega_j^P)$  – сила Магнуса,  $F_i^S = r_p^2 \rho_g C_S \nu^{1/2} (u_i - u_i^p) \left| \frac{du_i}{dx_i} \right|^{1/2} \text{sgn} \left( \frac{du_i}{dx_i} \right)$  – подъемная сила Сэффмена,  $F_i^g = m^p g_i$  – сила тяжести,  $\nu = \mu/\rho$  – кинематическая вязкость несущей фазы,  $\vec{\omega} = 0.5 (\nabla \times \vec{u})$ ,  $\vec{\omega}^p$  – угловые скорости частиц газа и дисперсной фазы относительно центра твердой частицы,  $l_i^p = 0.5\pi C_L r_p^5 \rho_g |\omega_i - \omega_i^p| (\omega_i - \omega_i^P)$  – момент импульса частицы при вращении относительно оси проходящей через её центр,  $C_M, C_S, C_L$  – коэффициенты, зависящие от характера относительного движения частиц в среде. Оценка слагаемых входящих в правые части системы 1.24–1.26 показывает, что для небольших частиц, быстро релаксирующих в несущем потоке, силой тяготения, а также силами Магнуса и Сэффмена можно пренебречь [64].

## Глава 2. Расчетные алгоритмы и программные средства

В данной главе представлены использованные алгоритмы вычислительной физики, а также приведено краткое описание разработанной объектно-ориентированной программной платформы для создания пакетов вычислительной газодинамики, на базе которой были проведены вычислительные эксперименты, анализ которых составляет содержание данной диссертации.

### 2.1 Численные методы решения системы уравнений математических моделей

Принципиальными особенностями детального моделирования процессов физики горения и детонации является необходимость точного воспроизведения сложных газодинамических потоков смесей реальных газов, контактных разрывов, акустических и ударных волн. При этом корректность результатов численного моделирования во многом определяется свойствами выбранного алгоритма численного решения исходной системы уравнений газовой динамики 1.1–1.6.

В рамках данной работы для решения системы уравнений газовой динамики был использован подход, основанный на эйлерово-лагранжевом методе, известном как метод “крупных частиц” [65]. В рамках метода “крупных частиц” построение разностных схем основано на принципе расщепления по физическим процессам. Процедура решения системы уравнений 1.1–1.6 разбивается на три основных этапа:

На первом этапе пренебрегают эффектами, связанными с потоками массы через границы ячеек неподвижной эйлеровой расчетной сетки. Изменение скорости газа на данном этапе считается обусловленным лишь наличием градиентов давления. Таким образом, выполняется расчет промежуточных значений

неизвестных параметров потока  $\tilde{u}_j$ ,  $\tilde{E}$ ,  $\tilde{Y}_k$ , а также  $\tilde{u}_j^p$  и  $\tilde{T}_p$  при расчете потоков газозвеси в континуальном приближении.

На втором этапе вычисляются потоки массы через границы ячеек эйлеровой сетки.

На третьем заключительном этапе дополнительно к потокам массы вычисляются потоки импульса и энергии и с учётом переноса этих газодинамических характеристик через границы ячеек и результатов, полученных на первом этапе, вычисляются окончательные значения газодинамических параметров потока  $u_j$ ,  $E_j$ ,  $\rho_j$ ,  $Y_k$ ,  $u_j^p$ ,  $T^p$  на новом временном шаге.

Приведенный в [65] алгоритм метода “крупных частиц” обладает первым порядком точности по пространству и времени. При выполнении расчетов была учтена модификация второго шага алгоритма, предложенная в [66], что позволило проводить устойчивый счет со вторым порядком точности по пространству. Как показали тесты сходимости данного метода, проведенные на классических задачах стационарного горения и детонации, для точного воспроизведения структуры фронта пламени необходимо использование расчетных сеток с размерами ячейки в 6 – 8 раз меньше ширины фронта пламени [67]. Все результаты, изложенные в настоящей диссертации, получены на расчетных сетках с размерами ячеек подобранными в соответствии с данным условием.

Система обыкновенных дифференциальных уравнений (1.13) описывающая многоступенчатый механизм химических превращений была решена методом Гира [68] для решения жестких систем. Решение уравнения переноса излучения 1.23 в диффузионном приближении было выполнено с помощью классического метода прогонки [69].

Метод “крупных частиц” был многократно апробирован и зарекомендовал себя при решении широкого круга проблем газодинамики горения и детонации, в числе которых задачи нестационарного ускорения волн горения и перехода к детонации в замкнутых объемах [36–38], анализ процессов горения в камерах сгорания и в частности анализ механизмов возникновения явления стука в дви-

гателях внутреннего сгорания [66; 70], исследования режимов распространения волн горения инициированных нестационарным источником энерговыделения [71] и режимов горения в газовой среде с градиентами температуры [72]. Всестороннее тестирование метода “крупных частиц” показало высокую точность воспроизведения экспериментальных данных и теоретических оценок параметров ударных волн в газах, параметров детонационных волн и ламинарного пламени [73]. Результаты тестов в водород-кислородной стехиометрической смеси с использованием кинетического механизма [49] приведены в таблице 1.

Таблица 1 — Сравнение параметров ударных волн, волн горения и детонации полученных из расчетов по методу крупных частиц и данных эксперимента и теоретических оценок, проведенное в [73]

Параметры ударной волны	Из вычислительного эксперимента	Теоретические оценки
Давление, бар	7.06	7.11
Плотность, кг/м <sup>3</sup>	1.67	1.60
Массовая скорость за фронтом ударной волны, м/с	947.45	943.25
Число Маха	2.5	2.5
Параметры самоподдерживающейся детонационной волны	Из вычислительного эксперимента	Лабораторный эксперимент [112]
Начальная температура смеси, К	300	298
Скорость волны, м/с	2722	2713
Отношение давлений в точке Чепмена-Жуге к начальному давлению	17.3	17.3
Температура в точке Чепмена-Жуге, К	3463	3278
Число Маха ведущей ударной волны	5.05	5.05
Параметры дефлаграции	Из вычислительного эксперимента	Лабораторный эксперимент [112]
Ширина фронта пламени, мм	0.32	0.26
Температура продуктов горения, К	3050	3100
Отношение плотности свежей смеси к плотности продуктов горения (коэффициент расширения)	8.2	8.4

## 2.2 Объектно-ориентированная программная платформа вычислительного пакета

Ввиду высокой вычислительной стоимости детального численного моделирования динамики химически активных газовых смесей и газовзвесей актуальными являются вопросы эффективности использования вычислительных ресурсов. Доступные на сегодняшний день высокопроизводительные вычислительные комплексы являются мощным инструментом для решения теоретических и прикладных задач физики горения и детонации, однако, развиваемая этими системами эффективность вычислений сильно зависят как от свойств выбранного вычислительного алгоритма, так и от его программной реализации.

Высокие пиковые мощности современных суперкомпьютерных систем достигаются за счет использования большого числа независимых вычислительных элементов, обрабатывающих данные одновременно, в так называемом параллельном режиме. Такая архитектурная особенность современных суперкомпьютерных систем диктует основное требование необходимое для эффективного решения вычислительной задачи – алгоритм решения должен обладать естественным параллелизмом и может быть разбит на отдельные части, выполняемые независимо друг от друга. При этом в соответствии с законом Амдала, потенциальное ускорение решения задачи при использовании большего числа вычислительных элементов ограничено относительным временем, затрачиваемым на последовательные операции, независимое выполнение которых не возможно [74]. Кроме наличия в алгоритме последовательных операций, эффективность использования параллельных вычислительных систем также уменьшается вследствие необходимости передачи информации между вычислительными элементами и также вследствие неравномерного распределения нагрузки между вычислительными элементами.

Решение системы уравнений газовой динамики методом “крупных частиц” может быть разбито на независимые подзадачи с помощью метода декомпози-

ции расчетной области, широко используемого для параллельного численного решения задач механики сплошной среды на многопроцессорных вычислительных системах [75]. В рамках метода декомпозиции расчетная область разбивается на подобласти по числу задействованных вычислительных элементов. При этом вычисление параметров потока на новом временном слое в каждой подобласти может быть выполнено независимо, если выполняется передача значений необходимых параметров потока из соседних подобластей. Объемы информации передаваемой с одного процессора на другой определяются размерами шаблона вычислительного алгоритма. Метод “крупных частиц” обладает достаточно компактным шаблоном и требует обмена приграничным слоем подобласти шириной лишь в одну ячейку. Существенным недостатком метода декомпозиции применительно к нестационарным задачам физики горения является сильная неравномерность вычислительной нагрузки между элементами, так как интенсивные химические превращения, требующие решения системы уравнений химической кинетики, проходят только в относительно небольшой части расчетной области за фронтом волны горения или детонации. Для более равномерного распределения нагрузки между вычислительными элементами могут быть использованы специальные алгоритмы динамической декомпозиции расчетной области на подобласти различных размеров [76].

Наряду с эффективностью использования вычислительных ресурсов, не менее актуальной в области компьютерного моделирования является проблема создания модифицируемых, многофункциональных пакетов вычислительных программ. Средств коммерческих пакетов вычислительной физики, таких как ANSYS Fluent, COMSOL Multiphysics и другие, не всегда достаточно для решения фундаментальных научных задач. В то же время закрытый исходный код коммерческих пакетов не позволяет пользователю модифицировать или добавлять новые физико-математические модели и алгоритмы, что в значительной степени ограничивает использование коммерческих пакетов для научно-исследовательской работы. Основным недостатком некоммерческих пакетов с открытым исходным кодом, поддержка и усовершенствование которых осу-

ществляется большими разрозненными группами пользователей, является большое количество ошибок, отсутствие полной документации и различный профессиональный уровень специалистов осуществляющих разработку и внедрение новых возможностей. Традиционный подход, сложившийся по отношению к разработке программного обеспечения в научно-исследовательской среде заключается в написании собственных небольших приложений, служащих для решения тех или иных конкретных задач. Приложения такого рода, написанные как правило, на популярных в научном сообществе процедурных языках программирования Fortran 90 или C, являются жесткими программными единицами, модификация и повторное использование которых в значительной степени затруднено. Организованные из таких приложений библиотеки программ являются важными и полезными инструментами при решении определенных типов задач, но с появлением все новых вычислительных архитектур и подходов к высокопроизводительным вычислениям, использование такого рода библиотек становится малоэффективным.

Появление нового стандарта языка Fortran 2008 позволяющего применять современные парадигмы обобщенного и объектно-ориентированного программирования, сделало возможным разрабатывать гибкие программные пакеты, обладающие широкими возможностями для дополнений, модификаций и повторного использования программных единиц [77], не теряя при этом высоких показателей вычислительной эффективности.

Для решения задач горения в рамках представленных в диссертации исследований была выполнена разработка программной платформы для численных расчетов задач механики сплошных сред с элементами объектно-ориентированных технологий разработки программного обеспечения. Основными математическими объектами, которыми оперирует вычислительная газодинамика, являются скалярные, векторные и тензорные поля. Естественным представляется описание этих объектов в виде отдельных пользовательских типов данных, или так называемых классов, содержащих в себе как информацию о параметрах или атрибутах объектов являющихся экземплярами данного класса,

так и об операциях или методах которые возможно выполнять над объектами. Классы представляют собой обособленные программные единицы, что делает возможным наращивание функциональных возможностей и модификацию внутренней структуры классов без изменений глобальной структуры использующих их программных пакетов. Разработанные классы скалярных, векторных и тензорных полей представляют собой программную платформу для реализации вычислительных пакетов на их основе. Важным компонентом классов полей являются средства для межпроцессорного обмена данными в рамках стационарной декомпозиции расчетной области реализованные с использованием библиотеки MPI, что позволило в единообразном ключе строить вычислительные пакеты и отдельные решатели с возможностью проведения вычислений на многопроцессорных кластерных вычислительных системах. Для проведения высокопроизводительных расчетов задач газовой динамики реагирующих потоков химически активных газов и газозвесей на базе разработанной программной платформы была создана библиотека классов, содержащая как классы полей, так и специальные вспомогательные классы для массовых операций обработки данных, считывания и записи параметров постановки вычислительной задачи и вывода данных в популярных форматах данных \*.plt, \*.vtk для последующей визуализации в графических пакетах Tecplot, VisIt или ParaView.

Использование библиотеки классов позволило разбить процедуру решения вычислительной задачи на два этапа – постановку задачи с помощью отдельного “интерфейсного” приложения и её решения вычислительным пакетом, состоящим из набора эффективных программ-решателей. Такое разбиение представляется особенно оптимальным для решения задач на удаленных кластерных вычислительных системах, так как за счет универсальности разработанной библиотеки классов, одинаковой для последовательных и параллельных архитектур вычислительных систем, позволяет контролировать этап постановки и проводить тестовые расчеты задачи до отправки данных и запуска задачи на удаленной вычислительной системе.

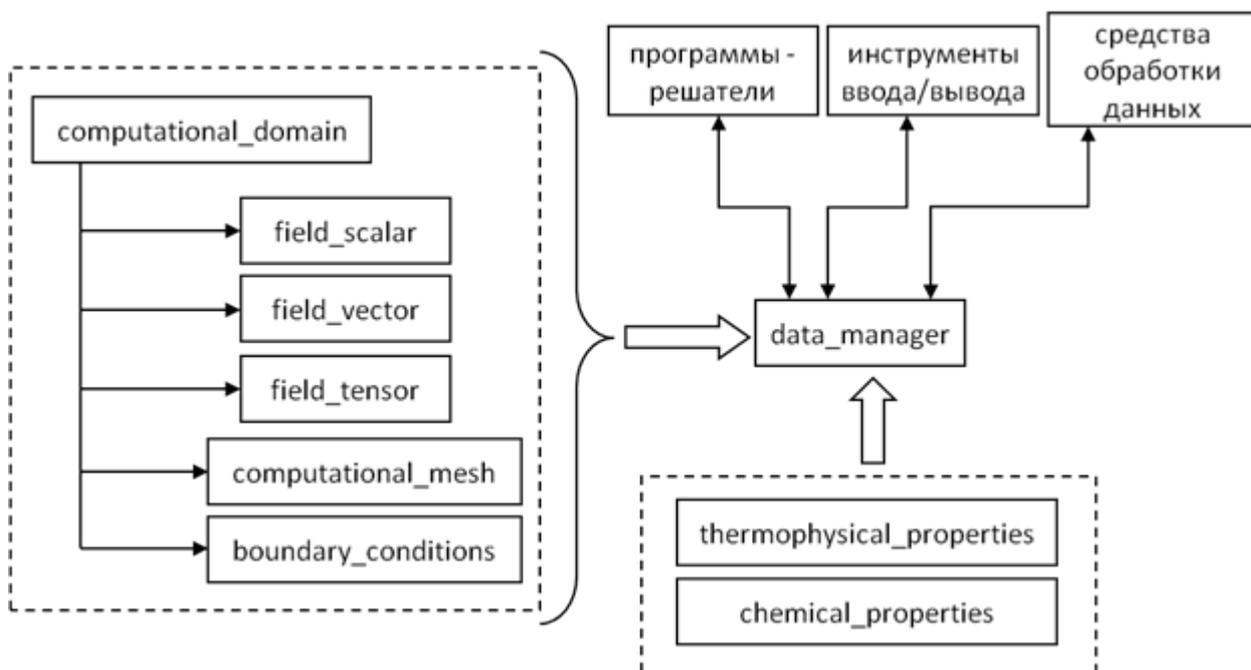


Рисунок 2.1 — Схематическое изображение элементов библиотеки классов.

Схематически разработанная библиотека классов представлена на рисунке 2.1. Здесь стрелками представлены информационные зависимости между отдельными элементами. Так, для создания экземпляров классов *field\_scalar*, *field\_vector*, *field\_tensor*, *computational\_mesh*, *boundary\_conditions*, обозначающих соответственно скалярное, векторное, тензорное поля, расчетную сетку и граничные условия необходим объект класса *computational\_domain*, который содержит информацию о числе ячеек расчетной области, её физических размерах, размерности пространства и используемой системе координат. Указатели на все созданные экземпляры полей, граничных условий и расчетной сетки содержатся в классе *data\_manager*, который необходим для осуществления глобальных операций ввода/вывода и обработки данных. Кроме того класс *data\_manager* содержит указатели на библиотеки теплофизических и химических свойств (*thermophysical\_properties* и *chemical\_properties*). Взаимодействие программ-решателей с библиотеками свойств и инструментами ввода/вывода и обработки данных производится через класс *data\_manager*.

Использование программ-решателей в пакете, реализующем расчет задач горения и детонации методом “крупных частиц” (*Solver*) основано на принци-

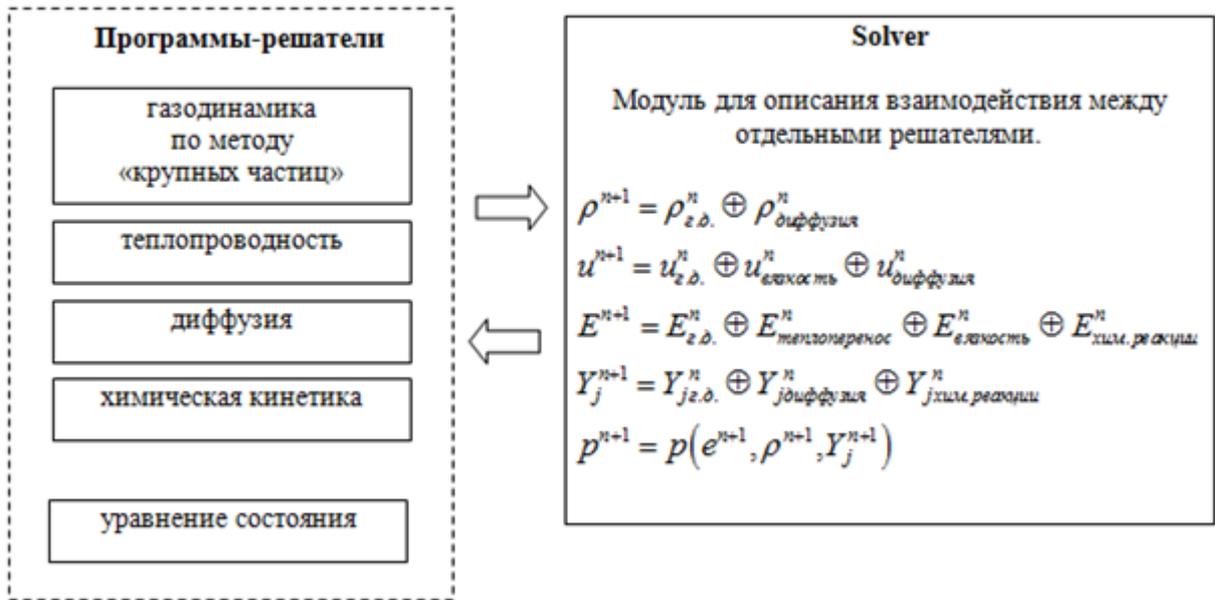


Рисунок 2.2 — Принципиальная схема использования отдельных программ-решателей в рамках расщепления алгоритма решения по физическим процессам.

не расщепления по физическим процессам. Так, отдельные решатели используются для расчетов газодинамических потоков, учета теплопроводности, учета молекулярной диффузии, решения уравнений химической кинетики и расчетов уравнения состояния (рис. 2.2). Гибкость разработанного подхода заключается в том, что работа отдельных решателей полностью независима. Благодаря этому, возможна разработка нескольких взаимозаменяемых решателей для расчетов одного и того же физического процесса, но различающихся по выбору физических моделей или математических алгоритмов.

### **Глава 3. Горение газообразных смесей в закрытых объемах.**

Данная глава посвящена исследованию физико-химических механизмов развития горения газообразных смесей в ограниченных объемах. В частности, рассмотрены процессы ускорения пламени и перехода от медленного горения к детонации в высокоактивных стехиометических смесях водорода с кислородом в гладких каналах в трехмерной геометрии, а также проанализированы особенности развития волн горения в замкнутых объемах, заполненных низкоактивными газовыми смесями водорода с воздухом близкими по составу к концентрационному пределу воспламенения. Основные результаты данной главы опубликованы в [I; III; IV; VI].

#### **3.1 Ускорение пламени и переход к детонации в трехмерном канале.**

Процессы формирования и эволюции волн горения в замкнутых и полукрытых объемах, заполненных горючими смесями газов наблюдаются во многих сценариях развития техногенных аварий, а также представляют собой основу рабочего цикла энергетических установок и двигательных систем. На практике возможна реализация различных режимов горения горючей смеси в зависимости от состояния смеси и внешних условий протекания процесса. Режимы горения, в частности, определяются геометрическими характеристиками наполненного горючей смесью объема, составом смеси, начальным распределением термодинамических параметров и свойствами источника воспламенения. Исследование режимов, возникающих при сгорании газовых смесей в протяженных каналах, таких как камеры сгорания двигателей, тоннели шахтенных сооружений или трубы экспериментальных стендов, является одной из наиболее важных задач как пожаро- и взрывобезопасности, так и разработки или со-

вершенствования перспективных двигателей. При этом ввиду своего высокого разрушительного потенциала, а также высокой энергетической эффективности сжигания топлива [78], особый интерес представляют детонационные режимы горения. Формирование детонации в каналах возможно как посредством мощного локализованного энерговыделения, ведущего к прямому инициированию детонационного горения, так и путем развития нестационарного процесса ускорения дефлаграционного горения при его распространении от источника воспламенения по каналу с последующим переходом к детонации (ПГД). Последний сценарий представляет наибольший интерес, так как не требует использования мощных источников энергии, что значительно повышает эффективность рабочего цикла технической системы проектируемой с целью получения преимуществ от сжигания топлива в детонационном режиме. В то же время, возможность формирования детонации при воспламенении смеси источником с интенсивностью меньшей пределов прямого инициирования детонации, должна быть учтена при разработке промышленных противоаварийных систем.

Явления ускорения пламени и перехода к детонации были предметом интенсивных исследований на протяжении более ста лет, однако конкретные физические механизмы ответственные за ускорение волны горения и переходный процесс между дефлаграционным и детонационным режимами до недавнего времени оставались недостаточно детально изученными. Одной из первых, выдвинутых для теоретического обоснования процесса нестационарного ускорения пламени, предшествующего переходу к детонации, была гипотеза о ведущей роли турбулентности, развивающейся в потоке, генерируемом при расширении нагретых продуктов горения [79]. Этому предположению способствовало экспериментально наблюдаемое увеличение темпов нарастания скорости распространения пламени в каналах с дополнительными перегородками или шероховатыми стенками, турбулизирующими поток [80]. Однако процесс ускорения пламени наблюдался и в гладких каналах, заполненных высокоактивными горючими смесями, где роль турбулентности снижается в виду относительно больших времен развития всего процесса ускорения пламени до перехода к детонации. Впервые

подробный анализ ускорения пламени от момента инициирования до достижения пламенем звуковой скорости был выполнен Я.Б. Зельдовичем [81]. Одним из выводов работы было заключение о первичной роли взаимодействия пламени с потоком и второстепенной роли турбулентности потока, которая лишь способствует более быстрой выработке профиля скорости впереди ускоряющегося фронта. В дальнейшем процессы ускорения пламени и перехода в детонацию обсуждались и исследовались экспериментально в гладких каналах [82; 83] или капиллярах [84]. И согласно проведенным на основе экспериментальных данных оценкам турбулентность не может быть основным механизмом ускорения, так как длительность всего процесса вплоть до перехода к детонации много меньше характерных времен развития турбулентности потока [67; 73]. Позднее были сформулированы более точные представления о физической природе процесса ускорения пламени в каналах [36; 85], учитывающие нелинейные взаимодействия между пламенем и формирующимся при его движении потоком в свежей смеси, на первостепенность которых впервые было указано Я.Б. Зельдовичем [81]. Сейчас, общие положения теории преддетонационного ускорения пламени можно считать достаточно надежными, однако для решения прикладных задач требуется более детальный дополнительный анализ реализуемых в натуральных экспериментах режимов ускорения пламени. В рамках настоящей диссертации соответствующий анализ был проведен на основе результатов двухмерных и трехмерных вычислительных экспериментов, описанию которых, посвящена настоящая глава.

Рассмотрим более детально явление перехода к детонации, возникающее в результате достаточно интенсивного ускорения пламени, как правило, реализуемого при распространении пламени в закрытых каналах или резервуарах. К сожалению, традиционно используемые экспериментальные методики визуализации потока имеют недостаточное временное разрешение для всестороннего детального исследования быстропротекающего процесса формирования детонации ускоряющимся пламенем [82; 86]. Теоретическое описание этого явления также в значительной степени осложнено большим количеством факторов и со-

путствующих нелинейных процессов. Наиболее продуктивным методом исследования перехода к детонации на сегодняшний день является сравнительный анализ результатов численного моделирования и натурных экспериментов.

Результаты экспериментов в смесях на основе водорода, являющихся предметом настоящего исследования, показывают, что сценарии формирования детонации в результате ускорения пламени, могут различаться в зависимости от состава смеси и геометрических характеристик канала. Интенсивное ускорение пламени в загроможденных каналах с дополнительными перегородками ведет к формированию сильных ударных волн в потоке, и детонация возникает в результате их взаимодействия с фронтом пламени [87] или после отражения от препятствий или боковых стенок канала [88]. Механизмы формирования детонации ускоряющимся пламенем в гладких каналах менее очевидны. В результате ускорения пламени в высокоактивных смесях детонация формируется непосредственно на поверхности фронта пламени [22], в то время как в менее химически активных смесях (при пониженном давлении или далеко от стехиометрического составе) процесс формирования детонации не устойчив и может протекать в трех экспериментально наблюдаемых режимах: детонация формируется на поверхности фронта; на контактной поверхности на некотором расстоянии от фронта в свежей смеси; или в результате видимого спонтанного ускорения пламени в пограничном слое вблизи боковых стенок канала [22]. Большинство развитых за последние десятилетия подходов к теоретическому обоснованию перехода к детонации в гладких каналах сводились к градиентному механизму, предложенному Я.Б. Зельдовичем [89], в рамках которого формирование детонации возможно при распространении спонтанной волны реакции на предварительно заданном градиенте времени задержки воспламенения смеси. В качестве причины формирования такого рода пути перехода к детонации указывалось на появление так называемых “горячих точек”, создающих градиент температуры и, соответственно, градиент времени задержки воспламенения в свежей смеси перед фронтом пламени [90]. При этом образование “горячих точек” обусловлено турбулентностью потока или когерентным наложением акустических волн,

излучаемых по мере выделения энергии в зоне реакции [91]. Предварительные расчеты с использованием простых одноступенчатых моделей химической кинетики показали возможность появления “горячих точек” в свежей смеси между фронтом пламени и ведущей ударной волной [90; 92]. Однако, как показали дальнейшие результаты численного двухмерного моделирования горения стехиометрической смеси водорода с кислородом с использованием детальных моделей химической кинетики [67; 73; 93], а также анализ экспериментальных данных [82; 83], температура смеси между фронтом пламени и ведущей ударной волной на момент перехода к детонации недостаточна для начала протекания экзотермической реакции. Кроме того, оценки, проведенные на основе детальных кинетических механизмов [72; 94], показали, что пространственные масштабы неоднородности температуры, необходимые для формирования детонации по градиентному механизму в высокоактивных смесях водорода с кислородом близких к стехиометрическому составу, слишком велики для реализации на практике.

Выявить физические механизмы ответственные за формирование детонации на поверхности фронта пламени при горении высокоактивных газовых смесей в гладких каналах удалось в недавней серии работ [36; 67; 73; 93], посвященных анализу моделирования ускорения пламени и перехода к детонации в плоских двухмерных каналах содержащих стехиометрическую смесь водорода с кислородом с привлечением детальных механизмов химической кинетики. Исходя из результатов, полученных в этих работах, авторами были определены физические механизмы, ответственные за смену режимов ускорения пламени, а также показано, что формирование детонации в гладком канале с условиями прилипания на стенках является следствием особенностей процесса ускорения пламени, в результате которого на масштабах зоны реакции формируется сильная ударная волна, способная инициировать переход от медленного режима горения к детонационному. В рамках настоящей диссертационной работы задача об ускорении пламени и переходе к детонации, в постановке аналогичной ис-

следованной в [67; 73; 93], была решена в расчетной области моделирующей трехмерный канал реальных масштабов [I].

Анализ результатов вычислительных экспериментов, проведенных в рамках настоящей работы, позволил также выявить физические механизмы, определяющие устойчивость пламени на стадии, предшествующей переходу к детонации и определяющие условия реализации различных режимов перехода к детонации, включая и условия очагового самовоспламенения перед фронтом пламени в смесях водорода с кислородом при пониженном давлении [IV].

### **3.1.1 Структура газодинамических течений формируемых в процессе ускорения пламени.**

Инициирование волны горения в трехмерном полуоткрытом канале с размерами 250x10x10 мм, заполненном стехиометрической смесью водорода с кислородом при нормальных условиях, задавалось вблизи закрытого торца канала в плоском слое газа с начальной температурой 3000 К. На боковых стенках канала задавались условия адиабатичности и торможения потока. Размер расчетной ячейки составлял 100 мкм, расчетная область была разбита на  $2500 \times 100 \times 100 = 25$  миллионов расчетных ячеек. Топология поверхности фронта пламени, развивающегося в канале, зависит от начальных возмущений присутствующих на поверхности иницирующего нагретого слоя, в связи с этим были проведены предварительные расчеты в каналах 5x5 мм с целью анализа трех характерных случаев: 1) воспламенение в слое без возмущений, 2) заданы регулярные малые возмущения поверхности нагретого слоя, 3) малые возмущения заданы случайным образом. Поверхность воспламеняемого слоя газа, а также развитая структура пламени представлены на рисунке 3.1. В случае воспламенения плоским слоем развивается так называемая тюльпанообразная структура пламени [20], в случае регулярных возмущений наблюдается одномодовая структура пламени,

наложение случайных возмущений на поверхности слоя приводит к формированию сложной многомодовой структуры, состоящей из нескольких выраженных струй. Однако в целом динамика развития волны горения во всех трех случаях остается неизменной. В связи с этим дальнейшие расчеты проводились в последнем варианте постановки задачи, так как наложение случайных возмущений отражает неидеальность условий проведения реальных экспериментов.

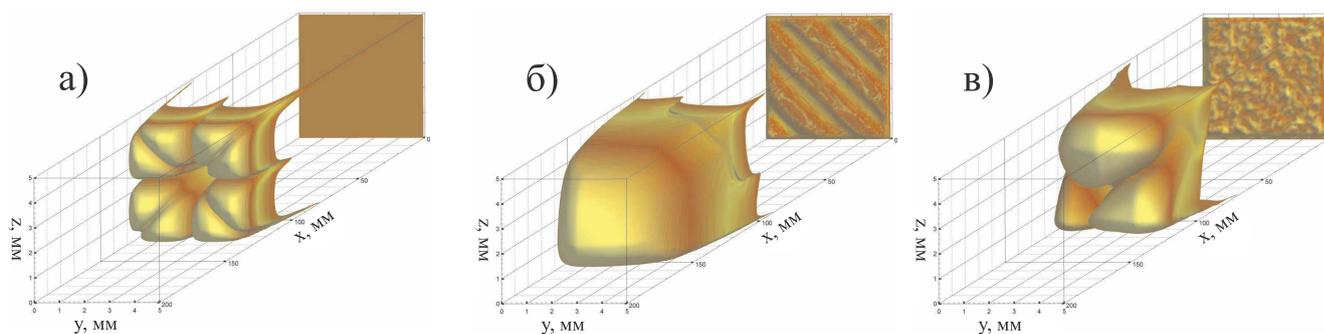


Рисунок 3.1 — Топология поверхности фронта пламени на момент времени  $t = 400$  мкс в канале в зависимости от структуры слоя нагретого газа (показана на дальней стороне у закрытого торца канала), инициирующего волну горения: в) плоский слой б) регулярные возмущения на поверхности слоя, в) случайные возмущения на поверхности слоя.

Сравнение двумерных и трехмерных расчетов показало, что наличие дополнительной степени свободы в трехмерном случае ведет к более стремительному развитию процесса. При этом качественные особенности динамики ускорения пламени в канале и перехода к детонации в двумерном и трехмерном случаях качественно совпадают и соответствуют наблюдаемым в реальных экспериментах [20; 95]. Зависимости давления в ведущей точке фронта пламени и её скорости для двумерных и трехмерных каналов приведены на рисунке 3.2. В обоих случаях процесс может быть разделен на четыре основных стадии, аналогично тому, как это было отмечено в работах [36; 73]. На первой стадии распространение волны горения происходит с практически постоянной скоростью и обусловлено расширением горячих продуктов реакции из зоны воспламенения. На второй стадии процесса зависимость скорости от времени приобретает экспоненциальный характер. Далее темп нарастания скорости падает и может

быть описан экспоненциальной зависимостью с меньшим инкрементом. Наконец, четвертая, финальная стадия процесса характеризуется резким увеличением скорости фронта пламени и формированием детонационной волны. Структура газодинамических течений на каждой из описанных стадий представлена на рисунке 3.3. Желто-оранжевыми поверхностями на рисунке представлена структура фронта пламени, зеленые поверхности показывают формируемые при движении фронта волны сжатия в свежей смеси. Синим цветом обозначена поверхность, условно выделяющая границу между ядром потока и пограничным слоем. На двумерных сечениях канала тонкими линиями со стрелками показаны линии тока, а сплошными линиями - изолинии массовой скорости потока.

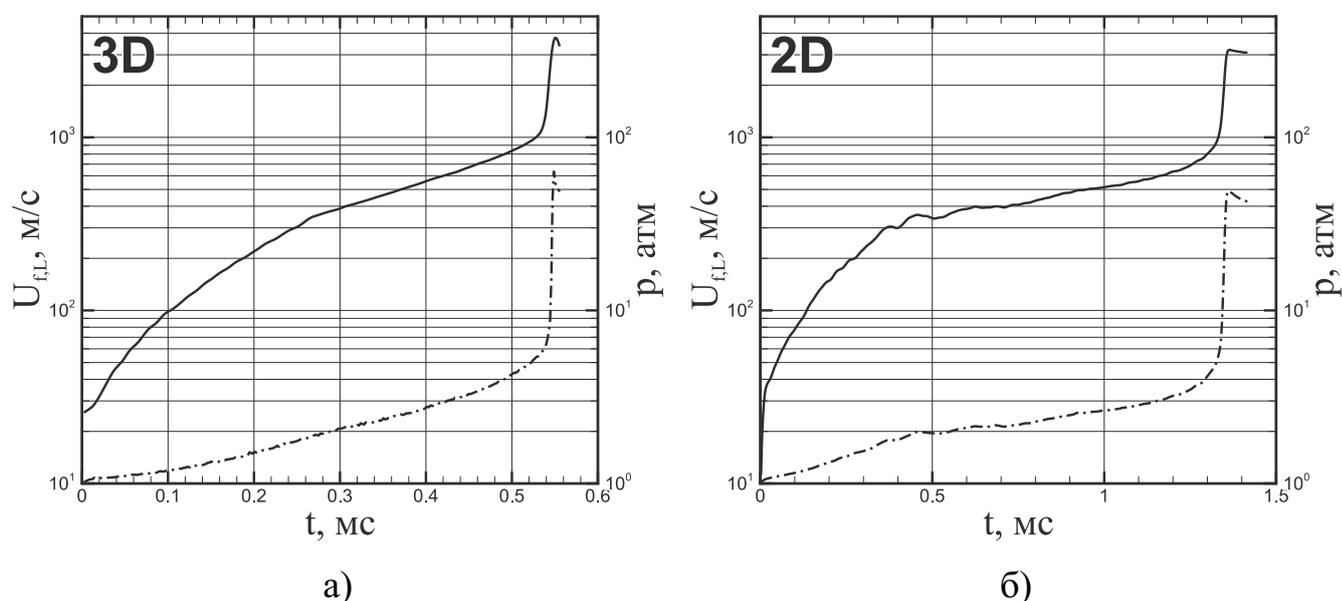


Рисунок 3.2 – Динамика скорости ведущей точки поверхности фронта пламени (сплошные линии) и давления в этой точке (штрихпунктирные линии) в зависимости от времени для а) трехмерных и б) двумерных каналов шириной 10 мм.

Из приведенных картин течений видно, что газодинамический поток перед фронтом пламени остается ламинарным на протяжении всего процесса ускорения пламени вплоть до перехода к детонации. Фронт пламени при этом имеет сложную нерегулярную структуру, применительно к которой в литературе, посвященной анализу теневых снимков или фотографий по шпирен методу, полученных в ходе лабораторных экспериментов, часто, по-видимому, ошибочно используется термин “турбулентный факел пламени” (англ. “turbulent flame brush”).

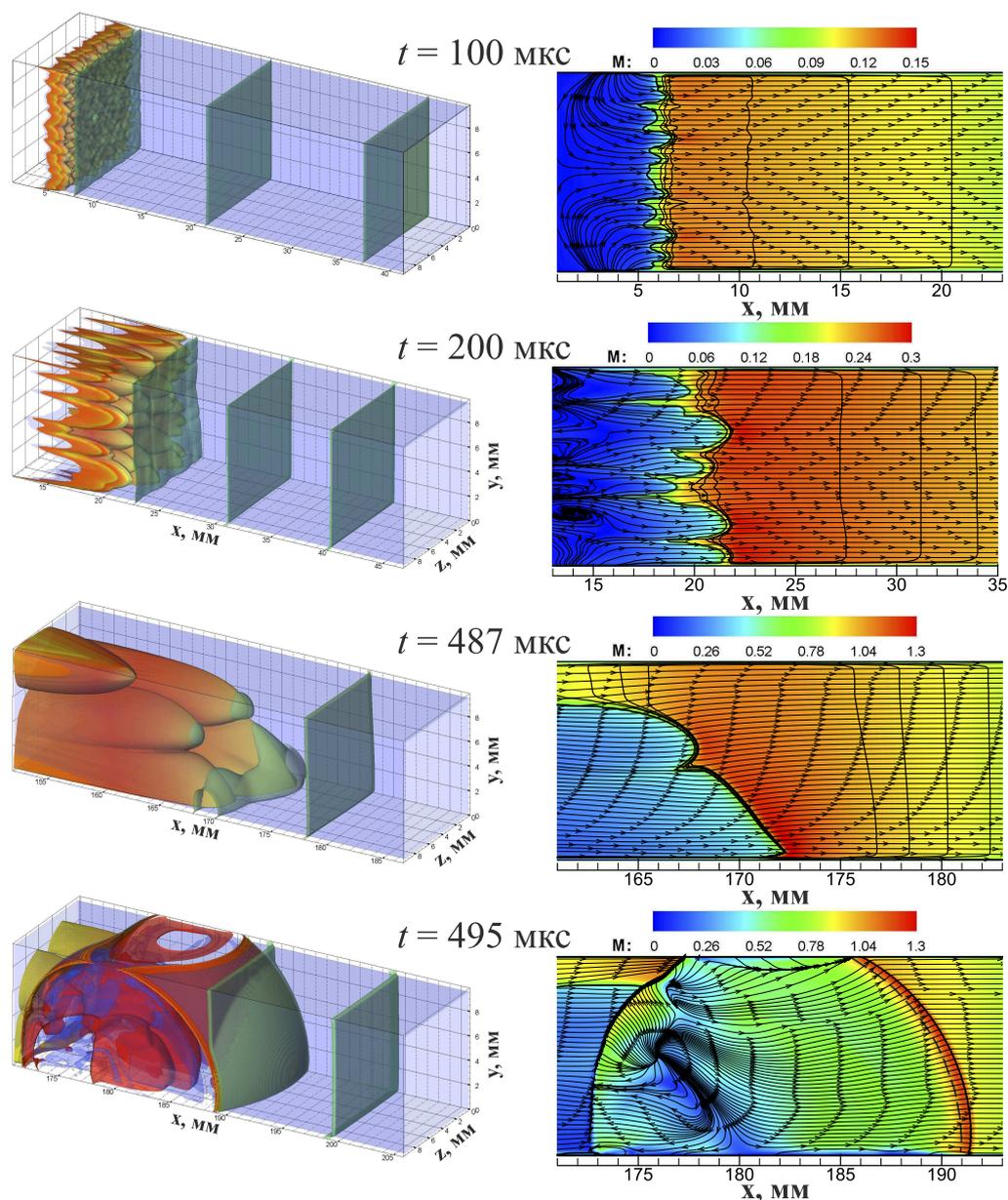


Рисунок 3.3 — Особенности газодинамических течений формируемых на различных стадиях ускорения пламени и перехода к детонации в трехмерном канале. Рисунки слева показывают структуру фронта пламени и волны сжатия в потоке перед фронтом на моменты времени 100, 200, 487 и 495 мкс. Соответствующие двумерные сечения канала ( $x, y, z = 5$  мм) приведены справа.

Заблуждение в данном вопросе особенно наглядно может быть разрешено с помощью полученных результатов трехмерного моделирования. Рассмотрим физические основы визуализации газодинамических потоков методами теневой и шпирен съемки [26]. В рамках метода теневой фотографии в ходе эксперимента получают снимки с изображением неоднородностей плотности газовой смеси

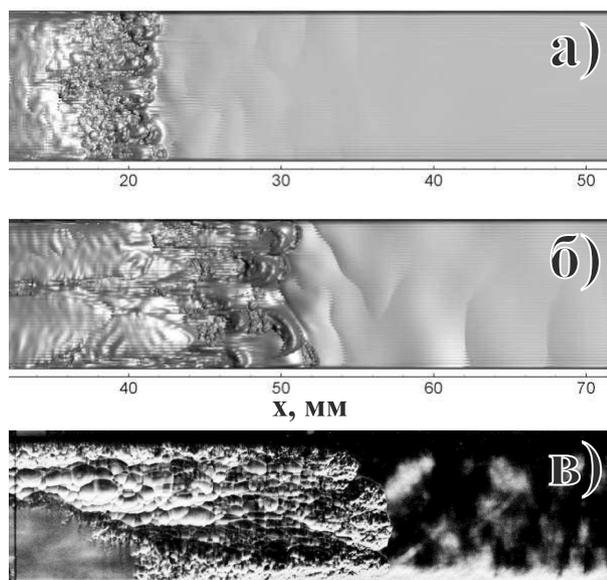


Рисунок 3.4 — Теневые изображения структуры фронта пламени на первой стадии ускорения пламени в канале. а) и б) получены из результатов трехмерных расчетов в моменты времени соответственно 200 мкс и 300 мкс, в) экспериментальный снимок из [83]

при прохождении параллельного пучка света через прозрачные окна в боковых стенках канала и преломлении его на градиентах плотности. При этом контрастность изображения зависит от величины второй производной плотности смеси в окрестности неоднородностей. В шпирен съемке используется так называемый световой нож, или нож Фуко, позволяющий избежать паразитной засветки и получить более контрастные изображения градиента плотности смеси. Оба метода визуализации являются принципиально двухмерными, а снимки трехмерных потоков, получаемые этими методами, представляют собой проекцию неоднородностей плотности на геометрическую плоскость экрана или фотопленки, что в некоторых случаях может привести к неверной интерпретации полученных изображений. Рассмотрим теневые снимки фронта пламени, полученные в лабораторных экспериментах и воспроизведенные из результатов трехмерных расчетов выполненных в рамках настоящей диссертации (см. рис. 3.4). Численные теневые фотографии получены наложением второй производной плотности смеси в каждом поперечном сечении расчетной области, что соответствует приведенным выше физическим принципам теневой визуализации. Полученные численно

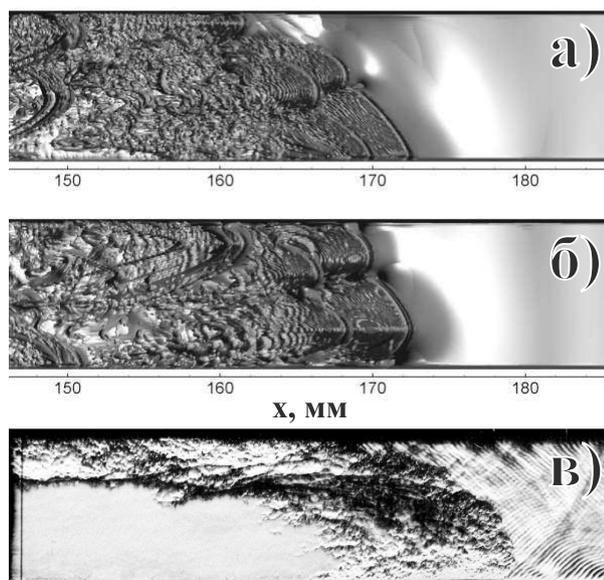


Рисунок 3.5 — Теневые изображения структуры фронта пламени на третьей стадии ускорения пламени в канале. а) и б) получены из результатов трехмерных расчетов в сечениях канала  $XY$  и  $XZ$  на момент времени 487 мкс, в) экспериментальный снимок из [83]

и в процессе лабораторных экспериментов теневые фотографии течений качественно идентичны. Их сопоставление показывает, что сложная структура фронта пламени, изображенная на рисунке 3.4в и принимаемая за турбулентную, в действительности представляет собой результат наложения световых лучей при их преломлении на различных участках поверхности фронта ламинарного ячеистого пламени (см. рис. 3.3). Сравнение аналогичных теневых фотографий в плоскостях  $XY$  и  $XZ$  с экспериментальными на третьей стадии ускорения представлено на рисунке 3.5. Как и на более ранних стадиях, процесс, протекающий в ламинарном режиме, при использовании методики теневой визуализации имеет вид «турбулентного» пламени. Таким образом, можно заключить, что визуализация реальных трехмерных потоков с помощью двухмерных представлений может содержать артефакты, и существенно искажать структуру течений, что значительно затрудняет или делает вообще невозможным корректную интерпретацию полученных результатов.

### 3.1.2 Роль волн сжатия в развитии горения в канале.

Описание динамики развития волны горения в полуоткрытом канале, полученное в [67; 73; 93] отражает основные стадии ускорения пламени и ключевые механизмы перехода к детонации. В этих работах учитывалась ведущая роль волн сжатия в ускорении фронта пламени, приводящем, в конечном итоге, к возникновению детонации. При этом эволюция волн сжатия во многом интерпретировалась исходя из традиционных представлений о вдвигающемся поршне. Однако, для более детального выявления роли волн сжатия на каждой из стадий процесса, в рамках настоящего исследования анализ нестационарного развития волны горения был выполнен в трёхмерной постановке на основе модели движущегося источника энерговыделения, аналогичной рассмотренной в [23], в рамках которой фронт пламени может быть представлен как набор движущихся источников энерговыделения конечного размера [III].

При движении каждый локальный участок фронта пламени, являясь источником энерговыделения, излучает волны сжатия, распространяющиеся во всех направлениях. Сложение волновых фронтов от каждого локального источника формирует волны сжатия, распространяющиеся как в сторону свежей смеси, так и в сторону продуктов горения. Скорость распространения этих волн сжатия определяется соответственно скоростями звука в свежей смеси и в продуктах горения. Непосредственно после воспламенения газовой смеси в узком плоском слое вблизи закрытого торца канала, волны сжатия, излучаемые с фронта пламени представляют собой плоские волны (см рис. 3.3). Волны сжатия, при движении в свежей смеси, передают импульс и энергию газу и тем самым формируют газодинамический поток перед фронтом пламени. Каждая последующая волна распространяется по более сжатой и нагретой смеси с большей скоростью, в результате поток перед фронтом пламени ускоряется, вовлекая в ускоренное движение сам фронт. Волны сжатия, излучаемые в сторону закрытого торца канала, отражаются от него и далее распространяются в сторону фронта пламе-

ни. На начальной стадии процесса, когда фронт пламени имеет скорость много меньшую скорости звука в продуктах горения и находится достаточно близко к торцу канала, волны сжатия, отражаясь от торца канала, успевают достигнуть фронта пламени и также передают дополнительный импульс и энергию газодинамическому потоку свежей смеси. Движение волн сжатия на данном этапе обеспечивает выравнивание давления в области продуктов горения за фронтом пламени, а расширение горячих продуктов из зоны воспламенения обуславливает достижение пламенем видимой скорости равной  $U_{f,L} = \theta U_f$ , где  $\theta$  – коэффициент расширения, равный отношению плотностей в холодной свежей смеси и горячих продуктах горения [18].

Ускорение потока свежей смеси определяет ускорение фронта пламени, скорость которого может быть представлена как  $U_{f,L} = U_f + u_f$ , где  $u_f$  – локальная массовая скорость потока. Профиль скорости потока в поперечном сечении канала, формируемый волнами сжатия на ранних стадиях процесса, имеет следующую структуру: скорость распределена практически однородно в ядре потока и стремительно уменьшается в пограничном слое вблизи боковых стенок канала. Неоднородное распределение скорости в поперечном сечении диктует растяжение фронта пламени в потоке, чем характеризуется вторая стадия процесса. Увеличение площади поверхности изначально плоского фронта пламени ведет к увеличению объема свежей смеси поглощаемой пламенем в единицу времени, что определяет экспоненциальную зависимость скорости ведущей точки пламени от времени на этой стадии  $U_{f,L} \sim \exp(\alpha t)$  [I; 85]. Ключевую роль в процессе адаптации поверхности фронта пламени к потоку в свежей смеси на данной стадии играют поперечные волны сжатия, возникающие за счет искривления поверхности фронта пламени. Отражение волн сжатия от боковых стенок канала и их взаимодействие с фронтом пламени определяет стабилизацию поверхности фронта. Окончание растяжения фронта пламени в потоке приводит к смене темпа нарастания скорости и переходу процесса ускорения пламени к третьей стадии. На данном этапе сохраняется положительная обратная связь между ускоряющимся пламенем и излучаемыми вниз по потоку волнами сжатия, ко-

торые обеспечивают дополнительный прогрев и сжатие свежей смеси. Этот газодинамический механизм определяет дальнейший экспоненциальный характер нарастания скорости пламени и является ключевым на данном этапе. С другой стороны, в связи с тем, что за две предыдущих стадии фронт пламени успевает пройти значительное расстояние от закрытого торца канала, роль волн сжатия излучаемых в направлении продуктов горения снижается, что определяет уменьшение инкремента нарастания скорости по сравнению с предыдущей стадией. Волны сжатия, отражаясь от закрытого торца канала, более не участвуют в непрерывном переносе импульса и энергии потоку свежей смеси, наравне с волнами сжатия, распространяющимися вниз по потоку. На данном этапе взаимодействие волн сжатия в продуктах горения может привести к формированию слабых ударных волн, которые дискретно воздействуют на фронт пламени, способствуя его локальному ускорению [96]. Этот эффект был наиболее заметен в двухмерной постановке задачи, где слабые ударные волны, хорошо различимые на профилях давления (см. рис. 3.6), воздействуя на фронт пламени приводят к возникновению осцилляции скорости ведущей точки на начальном этапе третьей стадии процесса (см. рис. 3.2). В трехмерном канале, благодаря большому количеству степеней свободы для рассеивания волн и большому темпу нарастания скорости на второй стадии процесса, роль слабых ударных волн формирующихся в продуктах горения менее выражена.

На рассматриваемой третьей стадии волны сжатия более не успевают выравнивать давление в продуктах горения, и на фронте реакции начинает формироваться пик давления (см. рис. 3.6). При преодолении пламенем скорости звука в свежей смеси непосредственно перед фронтом пламени, волны сжатия, излучаемые с поверхности фронта в сторону открытого торца канала, начинают отставать от фронта, двигаясь относительно него в направлении продуктов горения, и тем самым обеспечивая дополнительное сжатие в зоне реакции. Дальнейшее ускорение пламени на четвертой стадии, завершающейся формированием детонации, обусловлено положительной обратной связью между ростом давления на фронте пламени и увеличением скорости горения смеси.

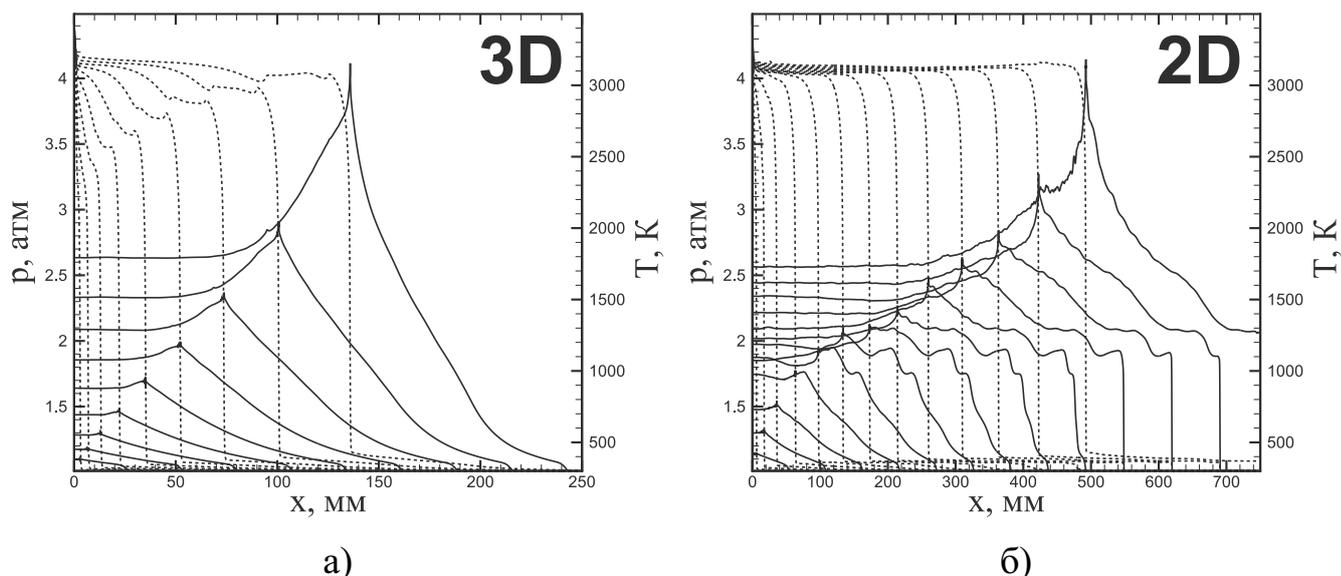


Рисунок 3.6 — Профили давления (сплошные линии) и температуры (пунктирные линии) канале в ведущей точке пламени на различные моменты времени. а) Трехмерный канал, начальный момент времени  $t_0 = 50$  мкс, промежуток времени между ближайшими профилями  $\delta t = 50$  мкс, конечный момент времени  $t_k = 500$  мкс, б) двухмерный канал,  $t_0 = 100$  мкс,  $\delta t = 100$  мкс,  $t_k = 1300$  мкс.

Начало четвертой стадия процесса характеризуется достижением пламенем локальной скорости звука, равной скорости звука в продуктах горения. С этого момента все газодинамические возмущения оказываются запертыми на масштабах зоны реакции и более не обеспечивают перенос импульса и энергии потоку перед фронтом пламени, что исключает возможность дальнейшего ускорения пламени за счет механизмов, имеющих чисто газодинамическую природу. Таким образом, дальнейшее ускорение пламени на четвертой стадии обусловлено только взаимосвязью между сжатием смеси на масштабах зоны реакции и химическими превращениями внутри неё. Из исследований механизмов химической кинетики окисления водород-кислородной смеси известно, что зависимость скорости горения от давления смеси не является монотонной [97] и существует переходный участок, связывающий механизмы химической кинетики при малых и высоких давлениях, в котором скорость горения падает с ростом давления. Характерный вид зависимости времени индукции от давления при фиксированной температуре показан на рисунке 3.7. В рассматриваемом случае стехиометрической водород-кислородной смеси, изначально находящейся при нормальных

условиях, давление на фронте пламени на момент начала четвертой стадии процесса составляет 10 атм, что соответствует области параметров, в которой скорость горения растет с ростом давления. Таким образом, сжатие на масштабах зоны реакции (и соответствующий этому процессу совместный рост температуры и давления) однозначно ведет к стремительному росту скорости горения, что в свою очередь способствует дополнительному ускорению пламени и последующему росту давления. В конечном итоге давление в зоне реакции достигает достаточно высоких значений для формирования интенсивной ударной волны, с параметрами необходимыми для поддержания устойчивого детонационного горения в свежей смеси. Полученные результаты трехмерных расчетов полностью воспроизводят предложенный ранее механизм перехода к детонации на фронте пламени [67; 73; 93]. В тоже время, проведенный дополнительный анализ всех ранее выделенных стадий ускорения пламени позволил детализировать роль генерируемых распространяющимся пламенем волн сжатия в развитии первой, второй и третьей стадий процесса и выделить важный механизм усиления пикового давления на четвертой стадии, связанный с влиянием давления на время индукции водородно-кислородной смеси. Полученные результаты одинаково проявляются как в двухмерных, так и в трехмерных постановках.

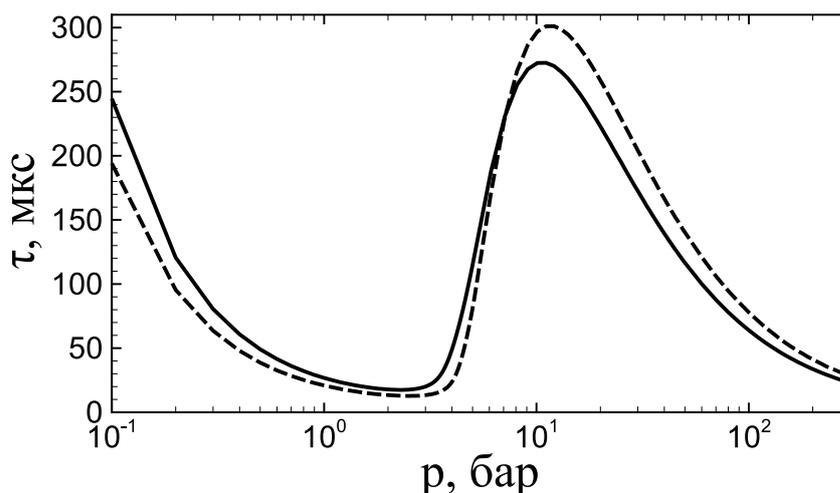


Рисунок 3.7 — Расчетная зависимость времени индукции смеси от давления для стехиометрической (сплошная линия) и эквимольной (штриховая линия) водород-кислородной смеси при температуре 1100 К.

### 3.1.3 Механизм перехода от медленного горения к детонации в условиях обратной зависимости скорости горения от давления.

В предыдущих разделах было показано, что уменьшение времени индукции реакции с ростом давления в смеси является важным фактором возникновения детонации на последней стадии самоускорения пламени. В тоже время, научный и прикладной интерес представляет также ситуация, когда время индукции растёт с ростом давления в среде. Для её анализа была рассмотрена модельная задача в двухмерной постановке, в рамках которой для уменьшения времени расчетов ускорение пламени до скорости звука в продуктах горения производилось в потоке, формирующемся при движении поршня в канале. Постановка аналогична экспериментам в ударно-волновых трубах, где камера высокого давления заполнена инертным газом, который играет роль поршня, а горючая смесь в канале отделена от камеры высокого давления диафрагмой. Воспламенение смеси инициировалось вблизи диафрагмы в момент её раскрытия. На верхней боковой стенке канала задавались условия прилипания, нижняя стенка канала трактовалась плоскостью симметрии. Камера высокого давления была заполнена азотом при давлениях 5 и 50 атм, канал был заполнен стехиометрической смесью водорода с кислородом при давлениях 0.1 и 1.0 атм. Динамика скорости ведущей точки пламени для двух вариантов выбора давлений, 50 атм в камере и 1 атм в канале и 5 атм в камере и 0.1 атм в канале приведена на рисунках 3.8 и 3.9. В первом случае механизм перехода от медленного горения к детонации соответствует рассмотренному выше. Во втором случае давление в зоне реакции на момент достижения пламенем скорости звука в продуктах горения достигает величины порядка  $\sim 2$  атм, что соответствует промежуточной области уменьшения скорости реакции с ростом давления. Это лимитирует темп нарастания скорости реакции во фронте пламени за счет сжатия, реализуемого в ходе развития рассматриваемой четвертой стадии процесса ускорения пламени. Ведущую роль в таком случае играют газодинамические механизмы, стабилизирующие скорость

пламени в окрестности величины скорости звука в продуктах горения, что диктует дальнейшее развитие процесса в осциллирующем режиме с чередованием фаз торможения и ускорения пламени. На стадии торможения фронта пламени скорость падает ниже скорости звука в продуктах горения, при этом можно также наблюдать уплощение поверхности фронта пламени. Далее пламя вновь ускоряется за счет газодинамических факторов, в частности за счет растяжения поверхности фронта в потоке. Таким образом, скорость пламени колеблется вблизи скорости звука в продуктах горения, а волна горения распространяется в виде двухфронтного комплекса состоящего из ведущей ударной волны и фронта реакции, следующего за ней на некотором расстоянии. Как фронт пламени, так и ударная волна движутся относительно свежей смеси со сверхзвуковой скоростью. Такой комплекс не представляет собой классическую структуру самоподдерживаемой детонации и характеризуется как значительным расстоянием между фронтом пламени и ударной волной, так и дефицитом скорости и величины сжатия по отношению к параметрам устойчивой детонации. В экспериментальных условиях такая двух волновая конфигурация так же наблюдается при распаде детонационного комплекса, например при переходе стационарной детонационной волны из широкого канала в узкий [98], ширина которого недостаточна для распространения в нем устойчивой детонации, или при прохождении детонационной волны через перфорированную преграду [99; 100].

Последовательная смена режимов ускорения пламени и торможения в рассматриваемом случае может привести к формированию условий для перехода к детонации по градиентному механизму Я.Б. Зельдовича. Рассмотрим одну из стадий торможения пламени. На рисунке 3.10 приведены профили давления и температуры, соответствующие стадии торможения пламени на третьем колебании скорости (см. рис. 3.9). Характерная структура потока вблизи фронта пламени на этой стадии представлена на рисунке 3.11. При торможении пламени, волны сжатия, которые ранее двигались позади сверхзвукового фронта горения, обгоняют его, передавая импульс и энергию свежей смеси перед фронтом пламени. При этом предварительно сжатая и нагретая смесь выталкивается из зоны III

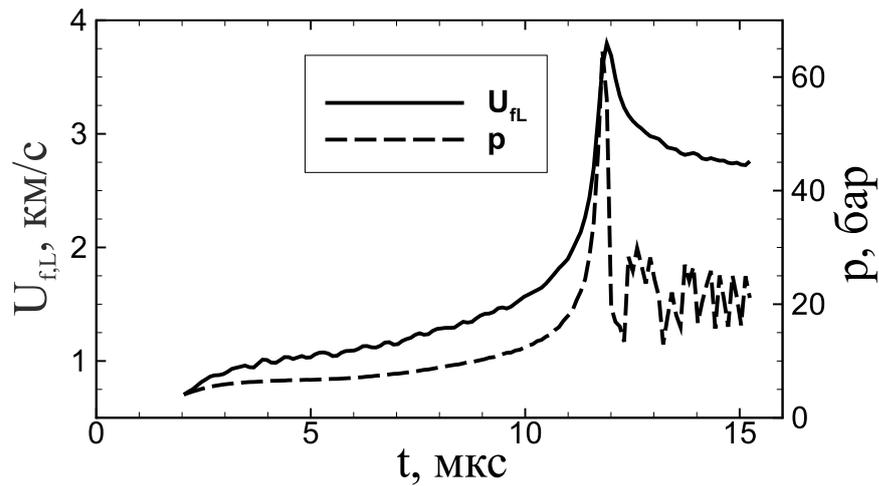


Рисунок 3.8 — Динамика скорости и давления в ведущей точке пламени соответствующая варианту начальных условий с 50.0 атм в камере высокого давления и 1.0 атм в канале.

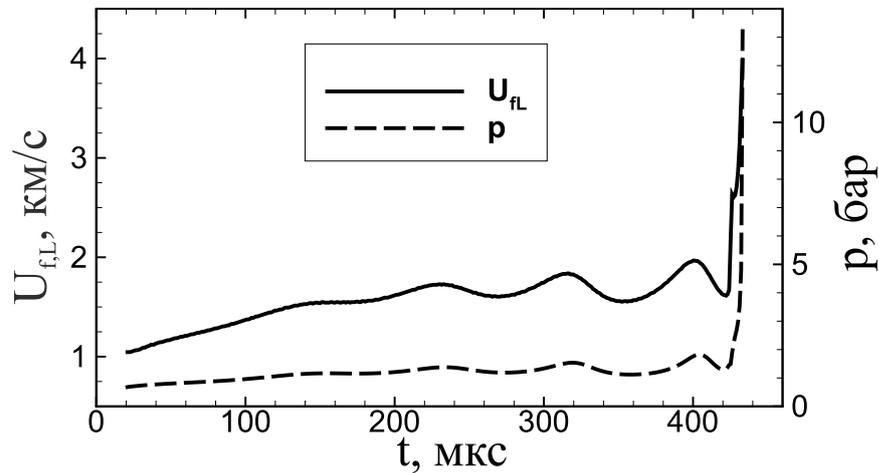


Рисунок 3.9 — Динамика скорости и давления в ведущей точке пламени соответствующая варианту начальных условий с 5.0 атм в камере высокого давления и 0.1 атм в канале.

(см. рис. 3.11) вниз по потоку относительно отстающего фронта пламени. Объем выталкиваемой сжатой смеси воздействует на смесь в области I перед ним аналогично движущемуся поршню, а граница между этими двумя областями представляет из себя контактный разрыв. Контактная поверхность, распространяющаяся между фронтом пламени и ударной волной, в комплексе с толкаемой ею впереди себя волной сжатия, может явиться зародышем нового очага самовоспламенения в свежей смеси, на расстоянии от фронта пламени. В зависимости от температуры на контактной поверхности и соответственно величины време-

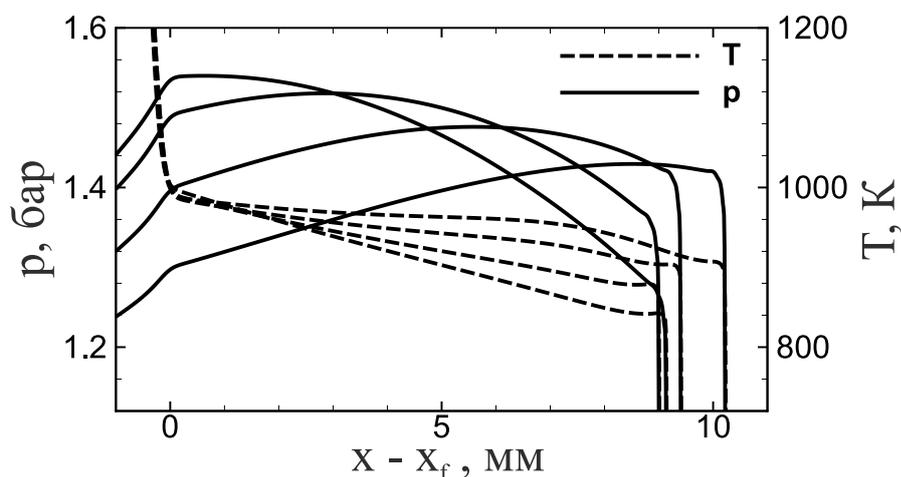


Рисунок 3.10 — Профили температуры и давления вблизи фронта пламени для задачи с условиями соответствующими рисунку 3.9. Начальный момент времени  $t_0 = 320$  мкс, промежуток времени между ближайшими профилями  $\delta t = 5$  мкс.

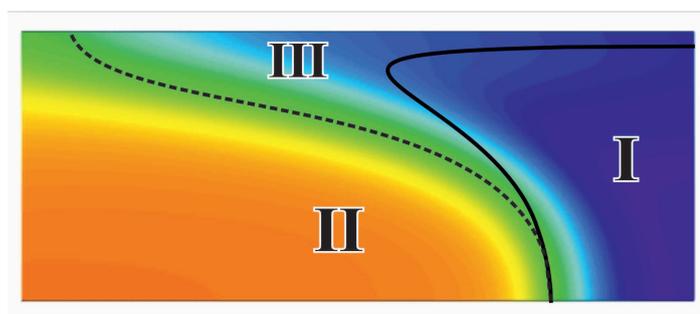


Рисунок 3.11 — Структура газодинамического потока вблизи фронта пламени (штриховая линия). Синим цветом обозначена зона свежей смеси, красным цветом – продукты горения. I – сверхзвуковое течение за ведущей ударной волной, II – продукты горения, III – сжатая и предварительно нагретая свежая смесь запертая сверхзвуковым потоком.

ни индукции воспламенение может произойти в непосредственной близости от фронта пламени или на расстоянии от него. При этом формируется новая волна реакции, которая распространяется вдоль градиента времени индукции, обусловленного дополнительным нагревом свежей смеси волнами сжатия. Максимум времени индукции соответствует фронту ведущей ударной волны, минимум – поверхности контактного разрыва. В соответствии с механизмом Я.Б. Зельдовича начальная скорость распространения волны горения определяется обратной величиной градиента времени индукции, что в данном случае соответствует величине скорости волны сжатия, формирующей градиент времени индукции. В

зависимости от величины этой начальной скорости новая волна горения может сразу сформировать детонационную волну или же инициировать детонацию при взаимодействии с ведущей ударной волной. При этом наиболее вероятным местом локализации нового очага воспламенения является пограничный слой вблизи стенок канала за счет более высокой температуры свежей смеси внутри него.

### 3.2 Особенности развития волн горения в низкоактивных смесях.

В предыдущем разделе процессы горения и детонации рассматривались в предположении об имеющем место стехиометрическом составе смеси, обеспечивающем наибольшую интенсивность протекающих реакций. В тоже время в условиях реальных аварийных ситуаций горючая смесь в замкнутых резервуарах, как правило, возникает из-за утечек взрывоопасных газов или в результате их выделения в атмосферу в ходе химических реакций. При этом может наблюдаться значительная неоднородность концентрации горючей смеси в занимаемом объеме. Для примера рассмотрим типичный сценарий развития аварии на АЭС [28; 29]. Неисправность системы охлаждения приводит к остановке течения теплоносителя, в качестве которого на практике часто используется вода. Из-за простоя теплоносителя происходит его резкое вскипание и расширение, что влечет за собой разгерметизацию реакторной зоны. В результате химического взаимодействия между циркониевыми стержнями и образовавшимся паром в значительных количествах начинает выделяться водород. Конвективные течения под контайнментом перемешивают водород с воздухом и водяным паром. Стратификация полученной в результате смеси под действием гравитационного поля ведет к формированию областей с различной концентрацией водорода [101]. В связи с высокой актуальностью решения задач пожаро и взрывобезопасности, сценарии развития горения в смесях с градиентами концентрации были тщательно исследованы как в лабораторных условиях [102; 103], так и методами численного моделирования [104]. Внимание большинства работ в этой области акцентируется на процессах ускорения пламени и перехода к детонации в смеси с градиентом концентрации, при её воспламенении в области занятой высокоактивной смесью близкой по составу к стехиометрической. Однако для более тщательной разработки критериев взрывобезопасности необходимо также исследовать возможность воспламенения в области пространства, содержащей обедненную смесь, что вполне возможно и наблюдается в реальных аварийных

ситуациях [105; 106]. Несмотря на то, что воспламенение бедной смеси, за исключением специальных случаев, не может инициировать устойчивого распространения пламени, возникающие при этом очаги горения, за счет конвективного переноса, могут стать источниками воспламенения в областях с большей концентрацией водорода. В связи с этим в рамках настоящей диссертационной работы были проведены исследования нестационарного процесса распространения пламени в бедных водород-воздушных смесях, что позволило выявить основные физические механизмы определяющие развитие тех или иных режимов горения.

Характерные пространственные объемы камер сгорания, используемых в экспериментах [107–109], посвященных определению пределов воспламенения и наблюдению распространения волн горения в бедных смесях, достигают порядка 10 литров. Однако корреляции, полученные экспериментально [110], указывают на возможность масштабирования решаемой задачи, что делает возможным использование подхода прямого численного моделирования исследуемых процессов на меньших пространственных масштабах, в камерах объемом в несколько литров. Рассмотрим развитие горения в цилиндрическом замкнутом объеме диаметром 20 см и высотой 10 см, заполненном водородно-воздушной смесью заданного состава. Инициирование горения задано вблизи нижнего торца цилиндра локализованным источником тепловой энергии 100 мДж. Согласно экспериментальным данным [111] такой источник энергии обеспечивает устойчивое воспламенение смесей с объемной долей содержания водорода более 5.6 %. дальнейшие результаты представлены для смесей с близкими к указанным значениям составами. Для моделирования была использована кинетическая схема горения водорода Ю. Варнатца [39], которая при источнике тепловой энергии 100 мДж, обеспечивает значение нижнего концентрационного предела воспламенения 4.2 %, а область устойчивого горения соответствует составам с содержанием водорода более 10 %. Основу проведенного в работе анализа составляют расчеты горения смесей с 6, 8 и 10 %-ным содержанием водорода. Для демонстрации различий динамики пламени в околопредельной смеси и смеси

обеспечивающей устойчивое горение также было рассмотрено развитие горения в протяженной полуоткрытой трубе диаметром 4 см, заполненной 16 %-ной смесью водорода с воздухом.

Процесс распространения пламени от точечного источника воспламенения в неограниченном пространстве аналогичен начальной стадии рассмотренного в предыдущем разделе движения пламени от стенки. Действительно свежая смесь, поступающая в диаметрально противоположные участки фронта сферического пламени, при сгорании формирует встречные потоки, которые компенсируют друг друга, обеспечивая стационарность продуктов горения, также как это происходит при взаимодействии натекающего и отраженного от закрытого торца потоков в случае распространения пламени от стенки. Данными потоками обусловлено формирование течения в свежей смеси перед фронтом. Записав баланс массы газа проходящего через фронт пламени в виде  $\rho_f u_f = \rho_b u_b$ , где  $\rho_b$  и  $u_b$  - плотность продуктов горения и скорость фронта пламени относительно неподвижных продуктов, а  $\rho_f$  и  $u_f$  - плотность свежей смеси и скорость распространения фронта относительно течения в свежей смеси, найдем, что  $u_b = \frac{\rho_f}{\rho_b} u_f = U_{f,L}$ , где  $U_{f,L}$  - скорость фронта пламени в лабораторной системе координат. Таким образом, после воспламенения смеси точечным источником, в неограниченном пространстве можно наблюдать изотропное расширение очага горения с постоянной скоростью  $U_{f,L}$ . Если величина  $U_{f,L}$  достаточно велика, что справедливо для высокоактивных смесей близких к стехиометрическому составу, влиянием гравитационного поля можно пренебречь и пламя распространяется от источника воспламенения изотропно на протяжении длительного времени. В случае низкоактивных бедных смесей величина  $U_{f,L}$  мала и характерные времена развития процесса гораздо больше. В связи с этим, при исследовании медленных пламен в низкоактивных газовых смесях необходимо учитывать эффекты плавучести в поле гравитационных сил.

На рисунке 3.12 представлена структура очага горения в водород-воздушной смеси с концентрацией водорода 6 %. В случае стехиометрической водородно-воздушной смеси с концентрацией водорода 29.6 % скорость лами-

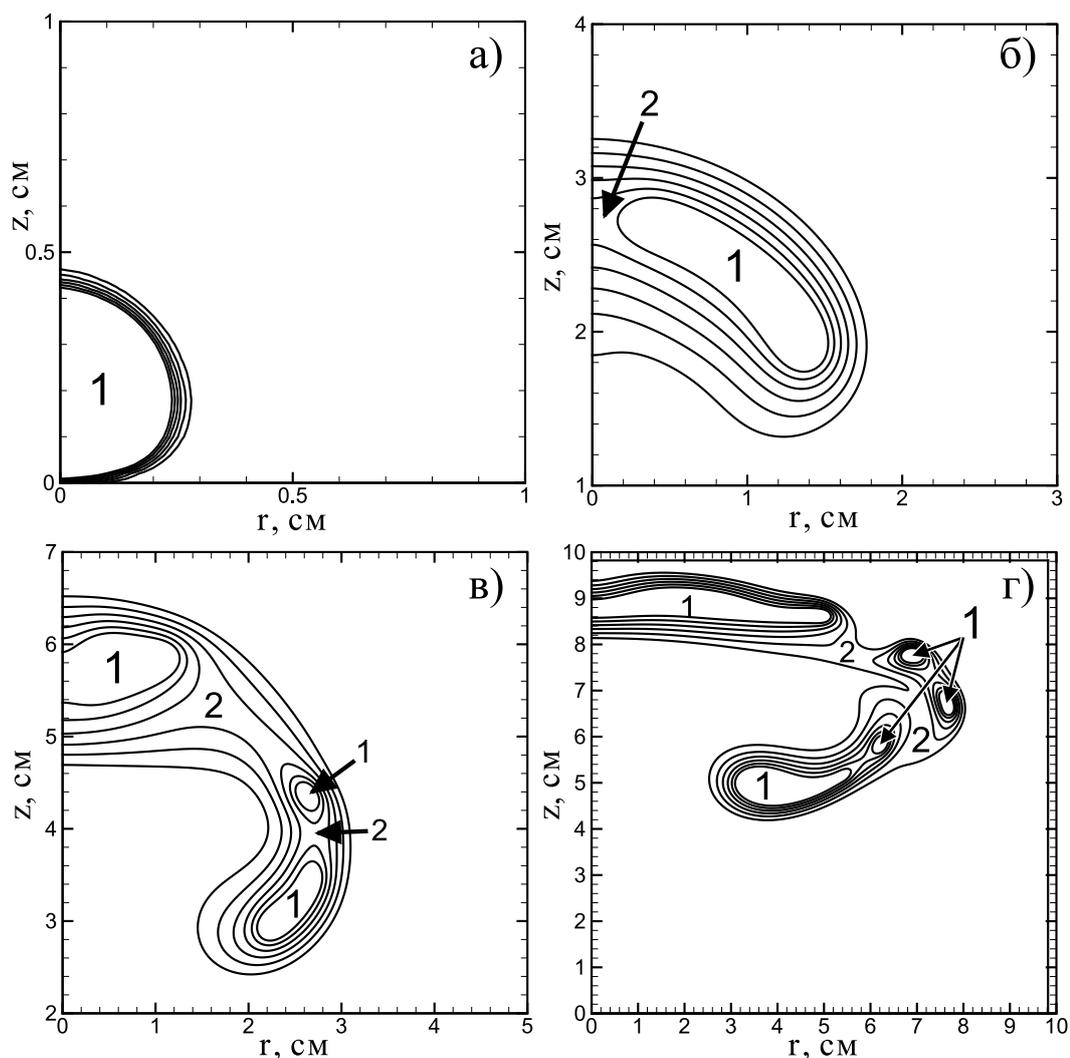


Рисунок 3.12 — Структура всплывающего в гравитационном поле очага горения водородно-воздушной смеси с концентрацией водорода 6 % на различных стадиях развития процесса горения в ограниченном объеме: а) воспламенение вблизи нижнего торца, левая граница – ось симметрии, 1-область очага химической реакции; б) всплывание очага горения в поле гравитационных сил; в) разрушение структуры очага горения и формирование ансамбля очагов меньшего масштаба, 2 – область затухания горения; г) многоочаговый режим распространения пламени.

нарного пламени составляет 2-3 м/с. В бедной смеси с содержанием водорода 6 % скорость горения составляет менее 0.1 м/с [112]. В этом случае развитие волны горения происходит в смеси уже успевшей несколько прогреться за счет теплопроводности и диффузии частично прореагировавшего газа, а также в результате конвективного переноса разогретых продуктов горения 3.12а,б. Таким образом можно считать, что вокруг зоны непосредственного горения форми-

руется область повышенной температуры и всю систему можно упрощенно представить в виде пузыря разогретого газа, движущегося в более холодной среде. При этом прирост нагретой массы газа и связанный с этим рост пузыря определяется не разогревом окружающего пузыря газа, а увеличением массы разогретых за счет экзотермической реакции на фронте горения продуктов горения. Процесс горения поддерживает также устойчивую границу пузыря с постоянным перепадом температуры между нагретой и холодной средами.

Рассмотрим результаты проведенного математического моделирования горения бедных смесей исходя из аналогии с всплыванием паровых пузырей [113; 114]. На начальной стадии процесса образовавшийся в районе точечного источника воспламенения объем горящего газа имеет сферическую форму и под действием архимедовой силы начинает вертикальный подъем (рис. 3.12а. Затем масса горячих газообразных продуктов горения деформируется, приобретая форму тора, который в процессе подъема сжимается к оси симметрии, формируя структуру, напоминающую всплывающий нагретый пузырь большого размера (см. рис. 3.12б. В этом пузыре возникают пульсации скорости и давления [113]. Последующая эволюция образовавшейся структуры (далее термик) близка к эволюции пузыря. До сближения с верхней стенкой замкнутого объема термик движется, как и большой пузырь, с почти постоянной скоростью, а его взаимодействие с переотраженными от стенок акустическими волнами приводит к усилению собственных пульсаций 3.12в, что в конечном счете ведет к разрушению изначальной структуры [113] и образованию ансамбля термиков меньшего масштаба 3.12г.

Для более детального изучения динамических процессов, сопровождающих эволюцию термика, воспользуемся моделью движущегося источника энерговыделения, использованную в предыдущем разделе. На фоне конвективного течения локальное энерговыделение и расширение газообразной среды внутри зоны реакции формирует волну сжатия, расходящуюся от каждого элемента поверхности фронта пламени. В случае симметрично расходящегося пламени, волны распространяющиеся в направлении эпицентра очага горения, пересека-

ют эпицентр и настигают фронт пламени с тыльной стороны, перенося импульс и энергию свежей невозмущенной смеси совместно с волнами, излучаемыми в направлении от эпицентра. Сферическое пламя излучает расходящиеся волны, которые в свежей смеси затухают экспоненциально с пройденным расстоянием. В связи с этим, в неограниченном объеме роль волн сжатия не так велика, как при распространении пламени в замкнутом объеме, где отражение от стенок определяет большую длительность жизни таких волн, а также их последующее взаимодействие с фронтом пламени. Как было показано в предыдущем разделе, роль отраженных волн в развитии горения высокоактивных смесей в ограниченных объемах носит принципиальный характер, определяя эволюцию поверхности фронта реакции за счет динамического воздействия и дополнительного нагрева и сжатия свежей смеси. В случае высокоактивных смесей интенсивность волн сжатия уже на ранних стадиях развития горения достаточно велика для формирования существенной деформации поверхности фронта и развития ячеистой структуры фронта за счет взаимодействия фронта пламени с волнами, отраженными от стенок объема (рис. 3.13). Согласно классификации режимов горения на основе соотнесения характерных пространственных и временных масштабов горения и внешнего газодинамического воздействия (турбулентности) [115], такое пламя описывается как ячеистое (*wrinkled flame*) или как пламя с широкой зоной реакции (*thickened flame*). В случае горения околопредельных смесей, как было отмечено выше, взаимодействие отраженных волн сжатия с нагретым не полностью прореагировавшим газом внутри всплывающего термика может приводить к формированию очагового режима распространения пламени.

Рассмотрим эволюцию фронта пламени при движении горячего термика в гравитационном поле. Согласно структуре, приведенной на рисунке 3.12, элемент фронта пламени, ориентированный вверх, распространяется практически без искажений в потоке восходящего течения. Боковой фронт подвержен развитию сдвиговых течений и акустическому воздействию, что ведет к его локальному растяжению и разрушению. Нижний фронт реакции растягивается за счет направленного вверх движения продуктов горения. Реакция начинается на

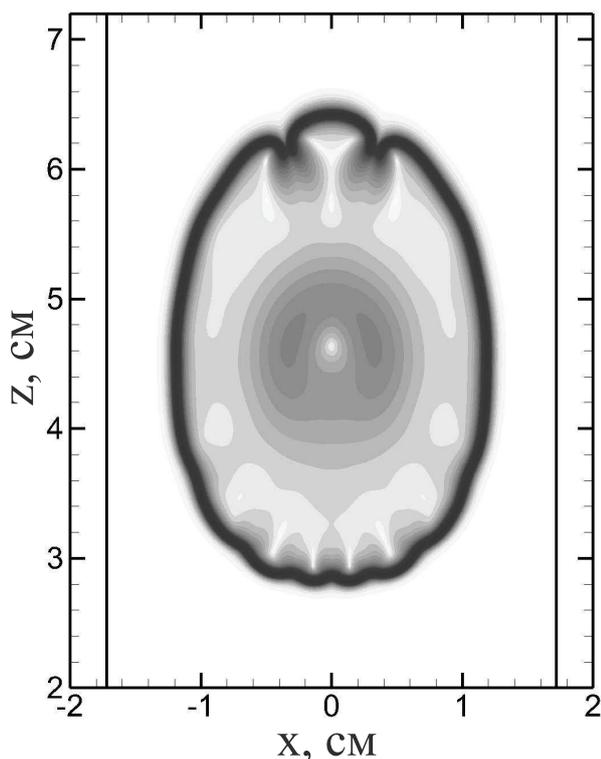


Рисунок 3.13 — Ячеистая структура поверхности фронта пламени, развивающегося в трубе диаметром 4 см, заполненной 16 %-ной водородно-воздушной смесью (горение инициировано на оси трубы на расстоянии 4 см от нижнего торца).

нижнем крае фронта, но в виду низкой активности горючей смеси не успевает реализовываться в полной мере, так как отток горячих продуктов горения вверх определяет падение теплового потока, и как следствие затухание реакции до её перехода в экзотермическую стадию. В результате развития описанного процесса и разнесения в пространстве горячих продуктов горения в частично прореагировавшей и далее охлажденной смеси, происходит формирование обедненной области в нижней части ограниченного объема, в котором изучается процесс. В конечном итоге, это определяет неполное сгорание топливно-воздушной смеси, возможное в режиме медленного горения (тления) только при обеспечении отсутствия оттока теплоты из системы (в математическом моделировании - при задании адиабатических граничных условий на стенках объема). В более реалистичном случае изначально холодных стенок камеры сгорания имеем

стратификацию только из двух слоев: горячих продуктов горения и холодного обедненного горючего.

### 3.3 Основные результаты.

В настоящей главе приведены результаты моделирования развития волн горения в замкнутых объемах, заполненных горючими газовыми смесями на основе водорода. Детально проанализирована структура газодинамических течений и выявлена роль волн сжатия, генерируемых при движении фронта пламени, в процессах ускорения пламени и перехода к детонации в высокоактивных водород-кислородных смесях стехиометрического состава в трехмерных полуоткрытых каналах. Отмечено влияние особенностей химической кинетики горения газовой смеси на стадии процесса ускорения пламени предшествующей переходу к детонации. Описан физический механизм перехода к детонации в условиях уменьшения скорости горения при повышении давления на масштабах зоны реакции.

Полученные результаты моделирования горения низкоактивных смесей водорода с воздухом, близких по составу к нижнему концентрационному пределу воспламенения, позволили определить основные стадии и проанализировать динамику распространения очагов горения бедных смесей в ограниченных объемах.

## Глава 4. Детонация в дисперсных средах.

Данная глава посвящена исследованию формирования и распространения волн дозвукового горения и детонационных волн в дисперсных средах, представляющих собой горючую газовую смесь с примесью взвешенных инертных микрочастиц. В частности, проанализированы механизмы инициирования детонации в дисперсных средах на основе стехиометрической водород-кислородной смеси посредством воздействия на среду оптического излучения. Рассмотрена концепция использования детонационных волн в газовых смесях для ускорения микрочастиц и имплантации частиц на твердотельную подложку. Основные результаты данной главы опубликованы в [V; VII; VIII].

### 4.1 Инициирование детонации путем лучистого нагрева локализованного слоя частиц.

Обеспечение эффективного сгорания газовых смесей представляет собой задачу первостепенной важности для многих отраслей энергетики и промышленности. В частности, в последние десятилетия ведутся интенсивные разработки технических устройств, построенных на принципе детонационного сгорания топлива в рабочем цикле, как более энергетически эффективного по отношению к горению при постоянном объеме (цикл Хамфри) или постоянном давлении (цикл Брайтона). Принципиальным вопросом на пути создания систем с детонационным циклом является обеспечение надежного способа инициирования устойчивой детонации в газовой смеси с наименьшими затратами энергии.

В зависимости от способа воспламенения горючей газовой смеси можно выделить два основных метода формирования детонации в камерах сгорания технических систем и экспериментальных стендов. Первый метод подразумевает так называемый мягкий режим воспламенения смеси от локализованно-

го источника энергии малой интенсивности или воспламенение газа нагретой поверхностью. В обоих случаях ввиду отсутствия интенсивного динамического воздействия на среду, после воспламенения реализуется режим медленного дефлаграционного распространения пламени. Формирование детонации становится возможным за счет процессов ускорения волны горения в ограниченных объемах и перехода к детонации. . Исследованию этих процессов посвящен первый раздел предыдущей главы настоящей диссертации. Недостатками данного метода являются энергетические потери по сравнению с идеальным циклом детонационного горения, связанные с конечными временами перехода от медленного горения к детонации. Для интенсификации процесса ускорения пламени и формирования детонации используют дополнительные перегородки в камерах сгорания, однако и в этом случае устойчивых режимов распространения детонации с параметрами близкими к параметрам Чепмена-Жуге удается достичь сравнительно редко [24; 25]. В рамках второго метода используются локализованные источники энергии высокой интенсивности, обеспечивающие воспламенение смеси в так называемом жестком режиме. Генерация интенсивной ударной волны при жестком воспламенении смеси ведет к прямому инициированию устойчивой детонации непосредственно после энерговыделения. Однако прямое инициирование детонации требует гораздо больших затрат энергии по сравнению с мягким воспламенением, что значительно снижает эффективность рабочего цикла при использовании данного метода.

Альтернативной возможностью воспламенения горючей газовой смеси является объемный нагрев газа взвешенными частицами. Микрочастицы могут быть добавлены в газовую смесь или присутствовать в смеси изначально, как это происходит в сооружениях горнодобывающей или химической промышленности. В то время как чистая газовая смесь является практически прозрачной в широком спектре электромагнитного излучения, взвешенные частицы могут быть нагреты при поглощении теплового или оптического излучения от внешнего источника. Впервые данный механизм воспламенения горючей смеси был детально проанализирован в экспериментальных работах [116; 117]. Воспла-

менение смеси при нагреве отдельной частицы субмиллиметрового диаметра внешним источником оптического излучения было рассмотрено в [117; 118]. Экспериментальные исследования данного процесса в случае облака взвешенных частиц также были проведены в [119; 120], где были получены зависимости времени воспламенения смесей на основе углеводородов от интенсивности внешнего источника, масштабов облака частиц и размеров отдельных частиц, а также проанализирована динамика процесса нагрева частиц и переноса теплоты окружающему газу.

Облако нагретых взвешенных частиц с большой объемной концентрацией представляет собой объемный источник тепловой энергии. Тепловой поток с поверхности каждой отдельной частицы нагревает окружающий её газ, в результате чего в газовой смеси формируется распределение температуры. В случае химически активных частиц, дополнительное энерговыделение и формирование горячих продуктов реакции ведет к более интенсивному нагреву газа. Перспективным представляется использование частиц на основе углерода, таких как наоалмазы, графит или нанотрубки, так как частицы данного типа имеют относительно небольшие энергии активации, что позволяет использовать источники излучения малой мощности (как было обнаружено [121] для воспламенения одностенных углеродных нанотрубок достаточно использования источников оптического излучения мощностью порядка  $100 \text{ мВт/см}^2$ ) для объемного нагрева газа [122] и ускорения процесса перехода к детонации [123].

В цикле работ, посвященном влиянию нагрева частиц излучением на динамику распространения пламени [116; 124; 125], было показано, что тепловое излучение от горячих продуктов горения может спровоцировать возникновение очагов воспламенения на расстоянии от фронта пламени в местах локализации взвешенных частиц. Как следует из недавних результатов численного моделирования [126] при воспламенении горючей смеси в облаке частиц, находящемся на расстоянии от фронта пламени, может быть сформирована как волна дефлаграции, так и детонация. На основе данных лабораторных экспериментов и численного моделирования, в рамках настоящей диссертационной работы были про-

анализированы возможные режимы воспламенения горючей смеси с примесью мелкодисперсных инертных взвешенных частиц и выделены механизмы, ведущие к формированию детонации. Расчеты проводились в рамках континуальной модели 1.19–1.21. Инициирование детонации в газовой смеси путем нагрева облака взвешенных частиц обладает важными преимуществами по отношению, как к прямому инициированию детонации, так и к формированию детонации в результате ускорения пламени. Так, данный метод не требует использования мощных источников энергии, что делает его энергетически более выгодным. С другой стороны, процесс формирования детонации локализован на пространственных масштабах порядка нескольких сантиметров, что значительно меньше характерных дистанций перехода к детонации даже при использовании различных методик турбулизации потока.

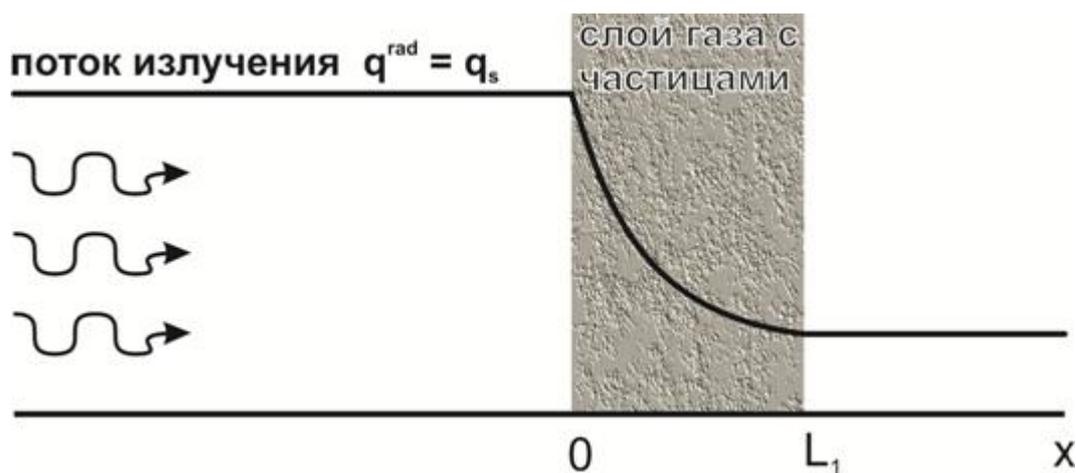


Рисунок 4.1 — Постановка задачи о воспламенении горючей газозвеси источником теплового излучения.

Рассмотрим следующую постановку задачи. Бесконечный плоский канал заполнен стехиометрической водород-кислородной смесью при нормальных условиях. В области шириной  $L_1$  (см. рис. 4.1 задано облако с однородным распределением примеси дисперсных микрочастиц со следующими параметрами:  $d_p = 1.0$  мкм, плотность материала частиц  $\rho_{p0} = 1.0$  г/см<sup>3</sup>, удельная теплоемкость  $c_{Pp} = 10^7$  эрг/г/К, объемная доля частиц  $\alpha_p = 1.0 \cdot 10^{-5} - 4.0 \cdot 10^{-5}$ . При данных условиях средняя длина свободного пробега излучения в облаке частиц оценивается как  $\Lambda = 6.7-1.7$  см. Постоянный во времени поток тепла излучается

от источника на левой границе канала ( $x \rightarrow -\infty$ ). Предполагается, что источник начинает действовать в начальный момент времени  $t = 0$ . Параметры источника подобраны аналогично тем, которые были использованы в экспериментах [122; 123]. Излучаемый поток тепла  $q_{s0} = \sigma T^4$  соответствует излучению от черного тела с температурой поверхности 5800 К. Время действия источника не было ограничено, так как в рассматриваемых условиях излучение от источника, как и излучение от горячих продуктов реакции, оказывало влияние только на эволюцию теплового взрыва в газовой смеси в области с добавлением взвешенных частиц и не сказывалось на дальнейшем распространении горения в чистой газовой смеси. Таким образом, полученные результаты могут также служить для оценки минимальной длительности импульса излучения необходимой для инициирования того или иного режима горения.

При нагреве частиц не учитывались изменения размеров частиц и фазовые превращения. Данное приближение допустимо, так как температура перед воспламенением в рассматриваемых случаях не превосходит значений 1050.0–1100.0 К. После воспламенения энергетический баланс изменяется главным образом за счет экзотермической реакции горения газовой смеси, и фазовые превращения практически не оказывают влияния на дальнейшую эволюцию процесса.

В рамках данной постановки задачи нагрев горючей газовой смеси определяется поглощением излучения частицами и дальнейшим переносом тепла с поверхности частиц окружающему газу. Степень неоднородности распределения температуры в газе полностью определяется объемной долей и пространственным распределением частиц. В процессе нагрева газовая смесь расширяется, вовлекая в свое движение взвешенные частицы. В результате локальная концентрация частиц уменьшается. С изменением локальной концентрации частиц в среде возникает неоднородное распределение длины свободного пробега, как это следует из соотношения  $\Lambda = 1 / \left( \pi (r^p)^2 N^p \right)$ . Если размеры облака частиц достаточно велики газодинамические факторы практически не влияют на структуру облака частиц и распределение температуры частиц соответствует профи-

лю потока излучения, который экспоненциально уменьшается при прохождении в толщу слоя ( $T(x) \sim \exp(-x/\Lambda)$ ). В случае меньших размеров облака характерные времена газодинамической разгрузки соизмеримы с временем нагрева и температура распределяется в облаке практически равномерно.

На рисунке 4.2 представлены характерные  $x-t$  диаграммы процесса нагрева и расширения облака частиц и формирования детонации в облаке размером 1.5 см. Длина пробега излучения равна 3.33 см и превышает размеры облака. На начальной стадии расширение облака происходит практически симметрично. Детонация возникает внутри нагретой области и выходит в холодную свежую смесь (на рис. 4.2а траектория устойчивой детонационной волны соответствует изотерме 3000 К). На рисунке 4.2б приведено более детальное изображение процессов воспламенения и формирования детонации.

В рассматриваемом диапазоне массовых долей частиц в газозвеси длительность нагрева до температуры воспламенения превышает акустические временные масштабы ( $t_{ign} > L/c$ , где  $c$  – локальная скорость звука). Таким образом, воспламенение возникает внутри неоднородно нагретого слоя газа при практически постоянном давлении. Режимы развития волны горения в данном случае соответствуют режиму нестационарного теплового взрыва, полученному Я.Б. Зельдовичем при решении задачи о воспламенении смеси на градиенте температуры [89]. На рисунке 4.2 область 3 между изотермами 1500 К и 3000 К соответствует эволюции теплового взрыва. В области между изотермами экзотермическая реакция протекает во всем нагретом объеме газа на протяжении конечного интервала времени. После формирования детонации изотермы сливаются, так как реакция теперь протекает внутри узкого промежутка, соответствующего зоне индукции структуры детонации ЗНД [127].

В соответствии с классификацией режимов, предложенной в [89], существует прямая зависимость между параметрами температурного градиента, особенностями развития теплового взрыва и формирующимся в результате режимом горения. При наличии градиента температуры (или в общем случае градиента реактивности смеси) тепловой взрыв эволюционирует в виде так называе-

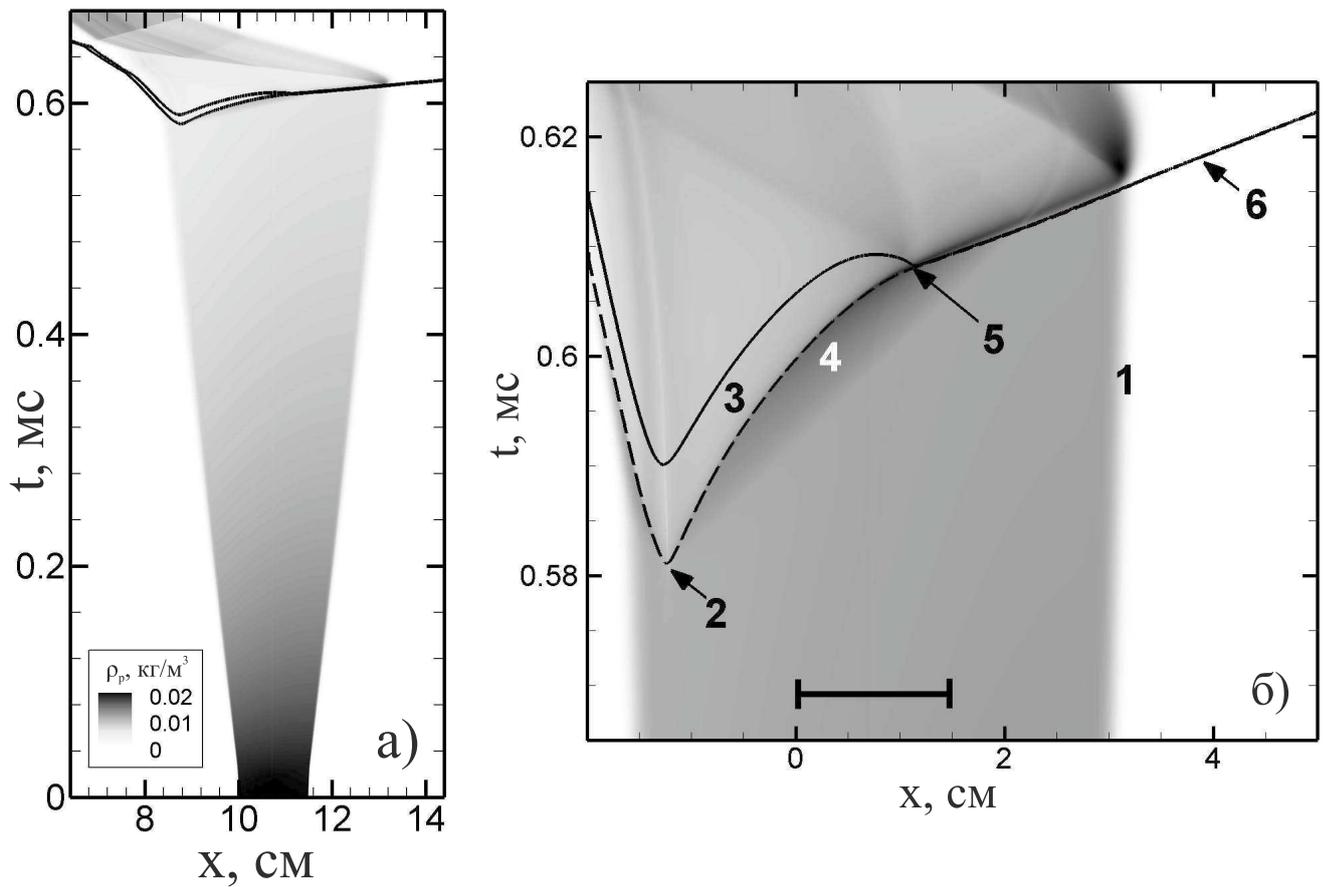


Рисунок 4.2 — Эволюция процесса нагрева газовой смеси с облаком частиц начальной ширины  $L = 1.5$  см ( $\Lambda = 3.33$  см) с последующим формированием детонации. Цветом показана массовая плотность частиц. Линиями обозначены изолинии температуры 1500 К (штриховая линия) и 3000 К (сплошная линия). На рисунке а) изображены все стадии развития процесса, на рисунке б) представлена более детально стадия воспламенения смеси и формирования детонации. Цифрами обозначены: 1 – дальняя по отношению к источнику граница облака частиц, 2 – первичный очаг воспламенения, 3 – область развития нестационарного теплового взрыва, 4 – область сжатия за ударной волной, 5 – точка формирования детонации, 6 – траектория детонационной волны в чистой горючей газовой смеси.

мой спонтанной волны реакции. Механизм распространения спонтанной волны реакции заключается в независимом воспламенении смеси вдоль температурного градиента с видимой скоростью равной  $U_{sp} = |\text{grad}(\tau_{ind})|^{-1}$ , при этом видимая скорость может достигать сколь угодно больших величин при уменьшении наклона градиента и асимптотически, для равномерно нагретого объема газа, стремится к бесконечности. При видимой скорости спонтанной волны превыша-

ющей скоростью звука за фронтом реакции следует волна сжатия. В зависимости от особенностей химической кинетики (например, немонотонной зависимости времени индукции от температуры) динамика развития спонтанной волны может иметь неравномерный характер, а формируемый в результате режим горения будет определяться взаимодействием между нестационарными волнами горения и волнами сжатия, генерируемыми на протяжении всего процесса. Детальный анализ эволюции спонтанной волны и возникающих в результате режимов горения в случае водород-кислородной смеси проведен в [72].

Рассмотрим режимы развития теплового взрыва, вызванного горением внутри слоев газовой смеси с добавлением частиц, в вариантах с различной начальной шириной слоёв. В случае тонких слоев практически однородное распределение температуры в слое ведет к формированию так называемой “недосжатой детонации” (см. рис. 4.3а). Волна реакции в этом случае характеризуется более высокой скоростью и меньшим сжатием по сравнению со стационарной детонацией. Данная волна состоит из фронта реакции, двигающегося со сверхзвуковой скоростью, и следующей за ним волны сжатия. При движении по сформированному градиенту температуры фронт реакции замедляется и его настигает волна сжатия, что приводит к формированию устойчивой детонации, которая проходит через границу слоя и далее движется в холодной газовой смеси. Однако в случае тонких слоев волна сжатия может не успеть догнать спонтанную волну реакции внутри нагретой области малой пространственной протяженности. Тогда волна реакции выйдет в холодную газовую смесь в форме слабой детонации, что не повлечет за собой инициирование устойчивой детонационной волны в газе. Таким образом, существует минимальное значение ширины слоя газа с частицами  $L_{min}$ , при котором возможно формирование устойчивой детонации.

При увеличении толщины слоя в среде формируется более крутой градиент температуры, скорость распространения спонтанной волны в этом случае меньше скорости звука и спонтанная волна вырождается в волну дефлаграции, а волна сжатия, обгоняя фронт реакции, переходит в ударную волну. Эволюция процесса в данном режиме изображена на рисунках 4.2 и 4.3б. На рисунке

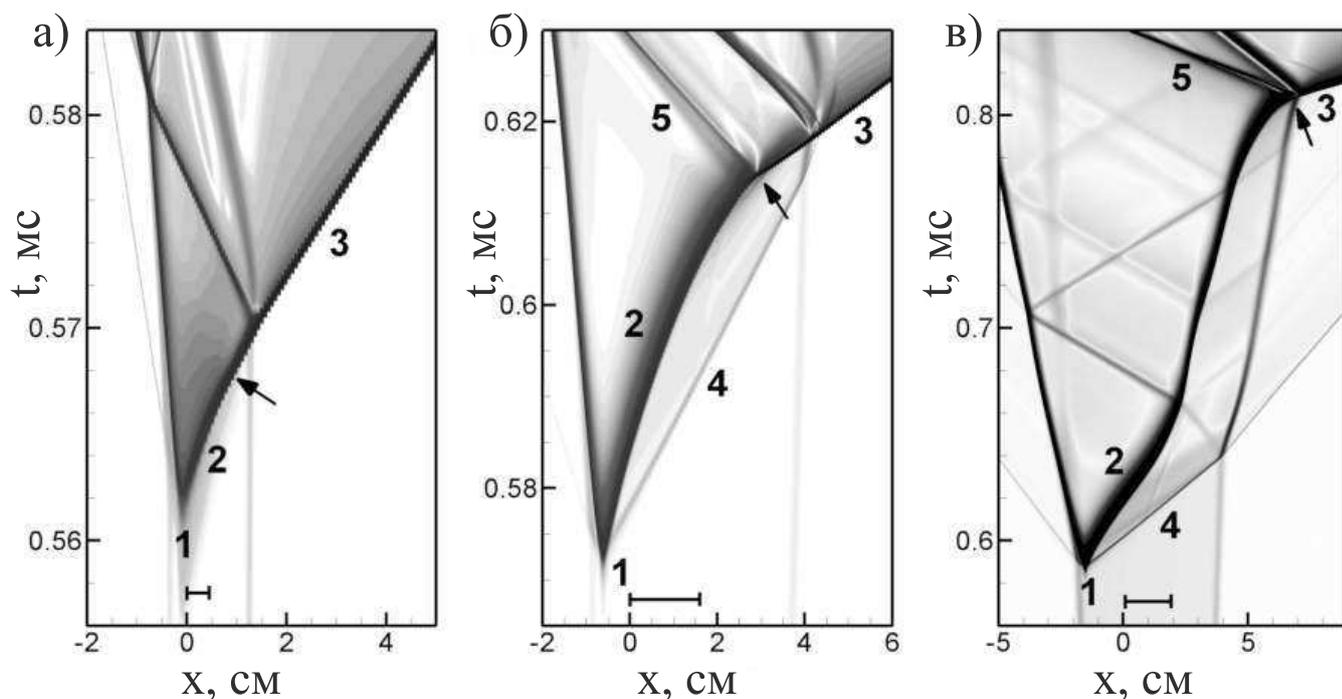


Рисунок 4.3 —  $x - t$  диаграммы развития процесса инициирования детонации внутри нагретого двухфазного слоя с длиной пробега излучения  $\Lambda = 3.33$  см. а – формирование детонации в результате взаимодействия недожатой детонации с волной сжатия в слое начальной ширины 0.5 см, б – формирование детонации в результате нестационарного ускорения пламени за ведущей ударной волной в слое начальной ширины 1.7 см, в – формирование детонации в результате взаимодействия волны горения и отраженных ударных волн в слое начальной ширины 2.0 см. 1 – первичный очаг, 2 – волна реакции, 3 – волна детонации в чистой газовой смеси, 4 – ударная волна, 5 – волна ретонации. Стрелкой показана точка возникновения детонации, горизонтальный отрезок показывает начальную ширину слоя.

4.2б зона энерговыделения в режиме нестационарного теплового взрыва обозначена цифрой 3, в то время как область сжатия за фронтом ведущей ударной волны обозначена цифрой 4. Из рисунков видно, что при увеличении ширины слоя формирование детонации происходит в результате процесса аналогичного рассмотренному в первом разделе предыдущей главы, а именно за счет нестационарного ускорения пламени за фронтом ведущей ударной волны. Возникающая в результате ускорения пламени детонационная волна распространяется в пересжатом режиме, и имеет достаточную интенсивность, чтобы сформировать

устойчивую детонацию после прохождения через контактную границу и выхода в холодную газовую смесь.

При дальнейшем увеличении толщины слоя, в смеси формируется еще более крутое распределение температуры и интенсивность ускорения волны горения за ведущей ударной волной не достаточна для перехода детонации на масштабах нагретого слоя. В результате максимально достижимым является режим быстрого дефлаграционного горения. Однако существует еще один сценарий формирования детонации. Ударная волна, частично отражаясь от дальней по отношению к источнику излучения контактной поверхности, движется в обратную сторону и взаимодействует с фронтом пламени. Возможно также взаимодействие фронта пламени с ударной волной отраженной от ближней к источнику контактной поверхности. Перенос дополнительной энергии и импульса отраженными волнами приводит к еще большему усилению ускорения фронта пламени и последующему переходу к детонации (см. рис. 4.3в. Механизм формирования детонации за счет взаимодействия фронта реакции с ударными волнами достаточно чувствителен по отношению к условиям протекания процесса и должен рассматриваться как неустойчивый сценарий. Данный сценарий не может быть реализован, если ширина слоя больше некоторой критической ширины  $L_{max}$ , при которой ударная волна затухает при прохождении от одной границы слоя до другой.

Таким образом, подводя итог можно заключить, что существует диапазон значений начальной толщины облака частиц, при котором нагрев частиц от внешнего источника теплового излучения с заданными характеристиками ведет к формированию устойчивой детонации в газовой смеси. На рисунке 4.4 обобщены результаты проведенных расчетов и показана ширина слоя частиц, обеспечивающая генерацию детонации по описанным выше механизмам в рассмотренном диапазоне длин пробега излучения.

Рассмотрим влияние мощности источника теплового излучения на процесс воспламенения смеси и последующую эволюцию горения. На рисунке 4.5 представлены зависимости местоположения первичного очага горения и

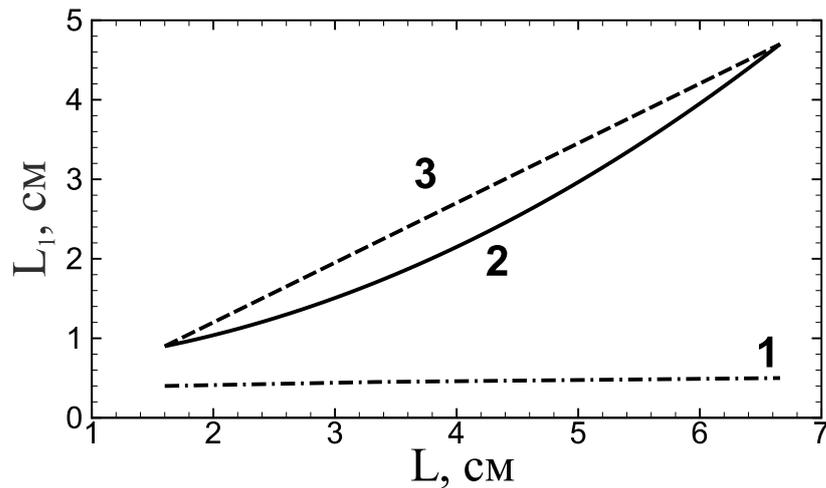


Рисунок 4.4 — Диаграмма реализации режима устойчивого детонационного горения в зависимости от начальной ширины облака взвешенных частиц в горючей газовой смеси. (1)  $L_{min}$  — минимальная ширина облака при котором возможно формирование детонации (штрихпунктирная линия) (2)  $L_{1max}$  максимальная ширина облака при котором формирование детонации происходит в результате развития нестационарного теплового взрыва (3)  $L_{max}$  — максимальная ширина облака при которой наблюдается формирование детонации с учётом детонации вызванной воздействием переотражённых ударных волн.

времени воспламенения от отношения потока энергии источника к величине  $q_{s_0}$  (излучение от абсолютно чёрного тела с температурой  $5800^\circ$ ). Длительность нагрева до температуры воспламенения уменьшается экспоненциально при увеличении потока энергии от источника, что на первый взгляд свидетельствует о возможности увеличения устойчивости предложенной методики. Более того, увеличение потока энергии приводит к смещению начального очага горения в сторону ближайшей к источнику границе облака частиц, тем самым уменьшая пространственные масштабы процесса формирования детонации. Однако необходимо учесть, что тепловое равновесие между нагретыми частицами и окружающим газом устанавливается за конечное время  $\tau^{gp}$ , определяемое характерными временами переноса тепла с поверхности частиц к газовой смеси. Таким образом, тепловое равновесие в рамках использованной двух температурной модели возможно только в том случае, если длительность нагрева ( $t_{ign}$ ) достаточно велика по сравнению с временем  $\tau^{gp}$ . В ином случае, при быстром нагреве по-

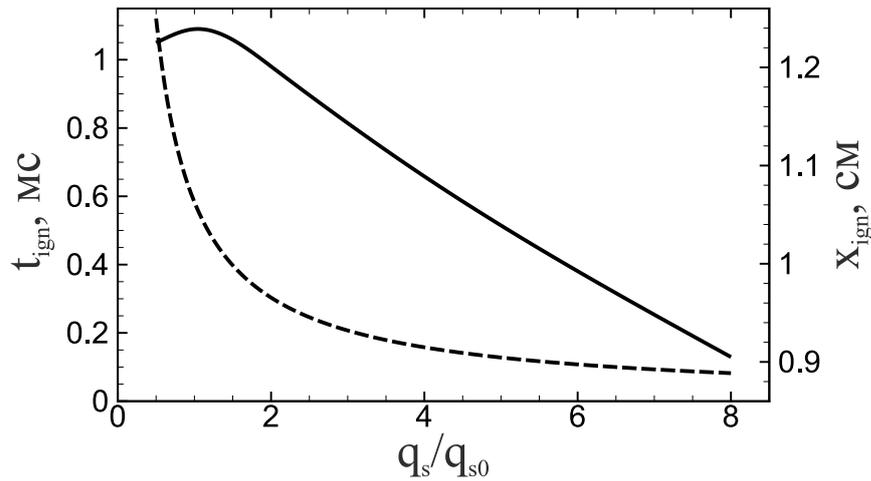


Рисунок 4.5 — Время воспламенения (пунктирная линия) и координата первичного очага воспламенения в системе координат связанной с начальным положением ближней к источнику границы облака (сплошная линия) в зависимости от теплового потока источника.

лучаем систему состоящую из горячих частиц взвешенных в холодном газе. При этом очаги воспламенения возникают независимо, в непосредственной близости от поверхности частиц, что не может привести к формированию детонации, так как реакция развивается внутри областей малого масштаба ( $\sim d_p$ ). Для рассмотренных выше случаев длины свободного излучения в облаке частиц  $\Lambda = 3.33$  см,  $\tau^{gp} \sim 50.0$  мкс, в то время как перераспределения тепла между соседними частицами  $\tau^{pp} = \frac{L_0 c_V \rho}{2\kappa}$  составляет порядка 300–400 мкс. Таким образом, в условиях реального эксперимента описанные выше режимы могут быть получены только при использовании источника теплового излучения с  $q_s < 1.5q_{s0}$ , в рамках погрешности связанной с неоднородностью пространственного распределения и размеров частиц.

#### 4.2 Использование детонации с целью создания направленного движения частиц для задач имплантации.

С точки зрения практических приложений, исследование детонационных режимов горения не исчерпывается задачами пожаро- и взрывобезопасности и энергетически эффективного сжигания топлива. Так, перенос частиц в сверхзвуковом потоке за фронтом детонационной волны является одним из эффективных методов нанесения покрытий из микро- и наночастиц на твердотельную подложку [128]. На рисунке 4.6 представлена схема первой детонационной пушки D-Gun произведенной в 50-х годах корпорацией Union Carbide, США для напыления микрочастиц на подложку. Характеристики данной технической системы, и её усовершенствованных за последние годы аналогов, остаются одними из наиболее высоких среди других устройств газотермического напыления [129]. Основным преимуществом детонационной имплантации частиц по сравнению с технологией газопламенного напыления является разгон микрочастиц в потоке до скоростей более 1000 м/с что значительно усиливает прочность сцепления частиц с материалом подложки [130]

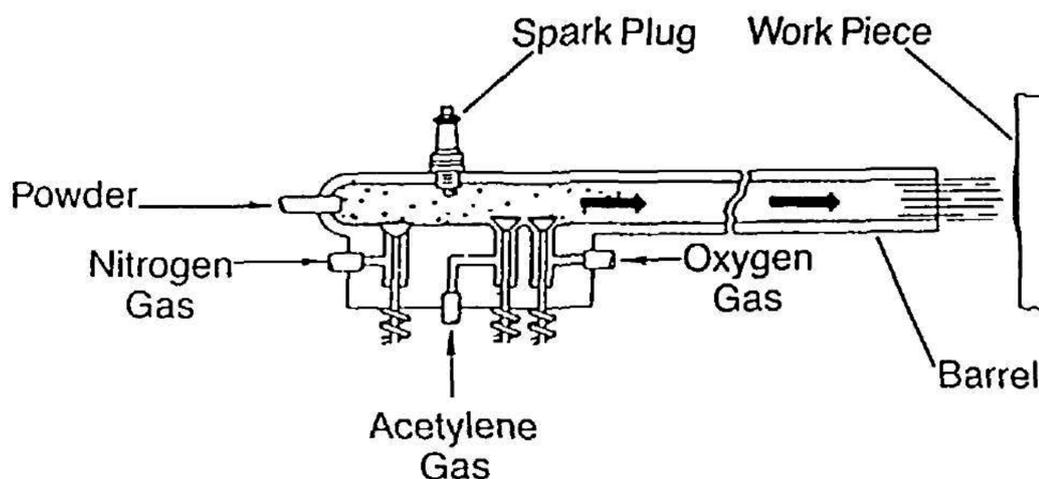


Рисунок 4.6 — Схематическое изображение устройства для нанесения микрочастиц на подложку в импульсе детонационной волны [129].

Детонационная волна, инициированная в стволе детонационной пушки, является самоподдерживаемой и сохраняет свои импульсные характеристики

вплоть до выхода из канала через сопло [131]. На выходе из сопла ударно-волновой импульс имеет конечную протяженность и амплитуду. Частицы, переносимые потоком за фронтом ударной волны частично оседают на твердотельной подложке, помещенной на заданном расстоянии от среза сопла. В зависимости от импульсных характеристик детонационной волны, от геометрии сопла и мишени, от размера и физико-химических свойств частиц меняются полезный расход частиц (процент частиц, достигших подложку) и распределение частиц на поверхности подложки. В рамках проведенных исследований, среди большого числа факторов, определяющих эффективность имплантации частиц на твердотельную подложку, основное внимание было уделено роли размера частиц в формировании гетерогенного потока. В частности было рассмотрено ускорение частиц с размерами от 1.0 до 100.0 мкм, вызванное детонацией в стехиометрической водород-воздушной смеси. В качестве критерия для оценки эффективности процесса имплантации была принята концентрация частиц осевших на подложке.

Рассмотрим следующую постановку задачи. В начальный момент времени полуоткрытый канал круглого сечения заданного диаметра (2 см) заполнен стехиометрической водородно-воздушной смесью при нормальных условиях. В канал помещены инертные микрочастицы заданного размера. На расстоянии 1-2 калибров от сопла расположена твердотельная преграда. Пространство между детонационной пушкой и преградой заполнено химически нейтральным газом. Задача была решена в приближении малой массовой концентрации частиц в газозвеси ( $\alpha_p = m_p/m_g \ll 1$ , где  $m_p$  и  $m_g$  – удельные массы фазы частиц и газовой фазы соответственно), что позволило использовать приближение слабо взаимодействующих частиц, не оказывающих влияние на характеристики потока, и динамику частиц описывать в приближении Стокса 1.24-1.26. В расчетах рассматривалось распространение детонационной волны в сегменте канала протяженностью 4 см, и её взаимодействие на слой взвешенных частиц при выходе из сопла. Предполагалось, что изначально частицы были распределены равномерно в тонком слое толщиной 1 мм вблизи среза сопла. Скорость детонацион-

ной волны и термодинамические параметры продуктов горения в потоке за её фронтом определялись термодинамикой горения стехиометрической водородно-воздушной смеси и имели следующие значения:  $D = 1.97$  км/с,  $p_{CJ} = 15.8$  атм,  $C_J = 2925.0$  К. Полученные результаты были подтверждены дополнительными вычислительными экспериментами с использованием континуальной модели микрочастиц и системы двухтемпературных, двухскоростных уравнений динамики гетерогенной среды 1.19-1.21.

Проанализируем динамику частиц в потоке за ударной волной, возникающей в результате затухания детонационной волны при выходе из канала в химически нейтральный газ. Так как инерционность частиц определяется временем релаксации их скорости к скорости газового потока, которое пропорционально плотности и квадрату диаметра частицы  $\tau_p \sim \rho d^2$ , частицы одной плотности, но разного размера вовлекаются в поток на разных участках течения, формируемого детонационной волной. В работе рассмотрена динамика частиц с плотностью  $\rho_0 = 1.0$  г/м<sup>3</sup>, однако с учетом подобия по времени релаксации результаты могут быть обобщены на случай больших плотностей ( $\rho_1 > \rho_0$ ) пересчетом диаметра частиц как  $d_1 = d_0 \sqrt{\rho_0 / \rho_1}$ .

Результаты численного моделирования показали, что частицы размером порядка 1.0 мкм начинают ускорение с некоторым запаздыванием относительно фронта детонации, двигаясь за точкой Чепмена-Жуге. Частицы размером 10 мкм ускоряются несколько позже, в области расширяющихся продуктов горения. Последнее совпадает с данными работ [128; 131], где рассматривается ускорение частиц с размерами более нескольких десятков микрон. При этом для наиболее малых частиц масса каждой из них практически не влияет на скорость в потоке, однако с ростом размеров частиц, более легкие частицы движутся с большей скоростью. На рис. 4.7 показано изменение со временем основных характеристик облаков частиц разного размера. Так как движение наиболее мелких частиц практически совпадает с движением газовой фазы непосредственно за фронтом детонационной волны, отраженная ударная волна практически мгновенно тормозит (метка 1 на рис. 4.7а) за своим фронтом подлетающие частицы размером

порядка 1 мкм и менее, препятствуя их оседанию на подложку. Часть частиц совместно с продуктами детонации подходит к поверхности подложки в момент времени  $t \sim 20$  мкс, но, вовлеченная в основное течение, далее разворачивается (метка 2 на рис. 4.7а). Частицы промежуточных размеров (рис. 4.7б) частично достигают поверхности в потоке продуктов детонации (метка 3 на рис. 4.7б), а частично вовлекаются в основное течение в зазоре, что объясняет практически постоянное расстояние от центра масс облака частиц до поверхности подложки, наблюдаемое на рис. 4.7б. Крупные частицы (размером порядка нескольких десятков-сотен микрометров), как более инерционные, не успевают ускориться непосредственно за фронтом ударной волны и вовлекаются только в формирующийся за ударной волной поток продуктов детонации. Накопленный этими частицами при движении в потоке импульс позволяет им преодолеть возвратные течения газовой фазы и достаточно равномерно оседать на подложке. Так, в варианте представленном на рис. 4.7в, частицы с диаметром  $d = 100$  мкм начинают оседать на подложке в момент времени  $t = 33$  мкс (метка 4 на рис. 4.7в) и на момент времени  $t = 47$  мкс практически все достигают подложки. Рисунок 4.8 иллюстрирует различие в распределении частиц размерами 1 и 100 мкм в несущем потоке между срезом сопла и поверхностью подложки на момент времени  $t = 45$  мкс. Мелкие частицы размером порядка 1 мкм вовлечены в вихревое течение продуктов детонации и сносятся потоком вдоль поверхности подложки (рис. 4.8а), тогда как все крупные частицы к рассматриваемому моменту времени оседают на поверхности подложки (рис. 4.8б).

Использование микрочастиц промежуточных размеров порядка 10 мкм создает режимы имплантации, неустойчивые к изменению внешних условий. Так, при увеличении расстояния от среза сопла до подложки в струйном течении развиваются сдвиговые неустойчивости и зарождается турбулентность, что может повлиять на развитие процесса имплантации частиц именно такого промежуточного размера. Часть из них может быть вовлечена в вихревое течение и далее выброшена из потока в невозмущенную область, что снижает количество им-

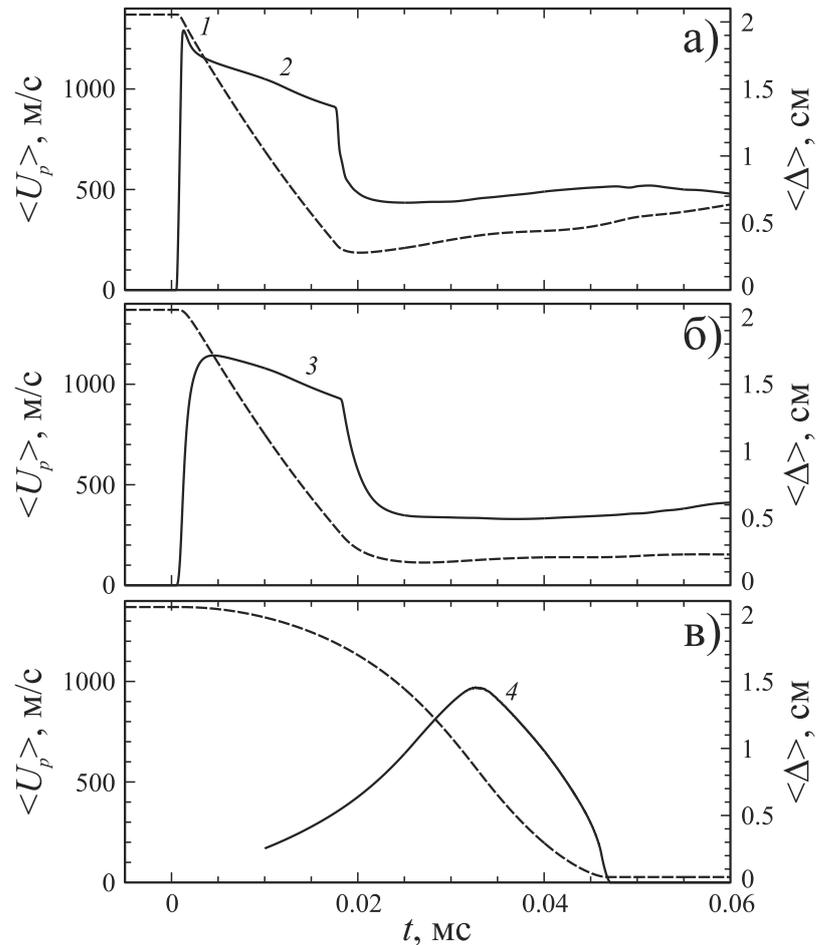


Рисунок 4.7 — Хронограммы средней величины модуля скорости частиц (сплошные линии) и расстояния центра масс облака частиц от подложки (штриховые линии). Плотность материала частиц  $\rho = 1.0 \text{ г/см}^3$ . Размеры частиц: а) – 1.0 мкм, б) – 10.0 мкм, в) – 100.0 мкм.  $t = 0.0$  мс – момент выхода детонационной волны из сопла канала. Цифрами отмечены характерные стадии, выделенные в проведенном анализе процессов.

планируемых частиц. Отраженные от подложки ударные волны также оказывают воздействие на частицы, искажая их траектории.

Заметим, что для размера частиц от нескольких десятков до сотни и более микрон, наиболее часто используемых для имплантации в настоящее время, газодинамические возмущения практически не оказывают заметного влияния на динамику транспортируемых детонационной волной частиц. Однако для ускорения и переноса частиц размером порядка 10 мкм и менее, интерес к которым в связи с созданием перспективных наноструктурных материалов в настоящее время возрастает, эти возмущения играют существенную отрицательную роль. В

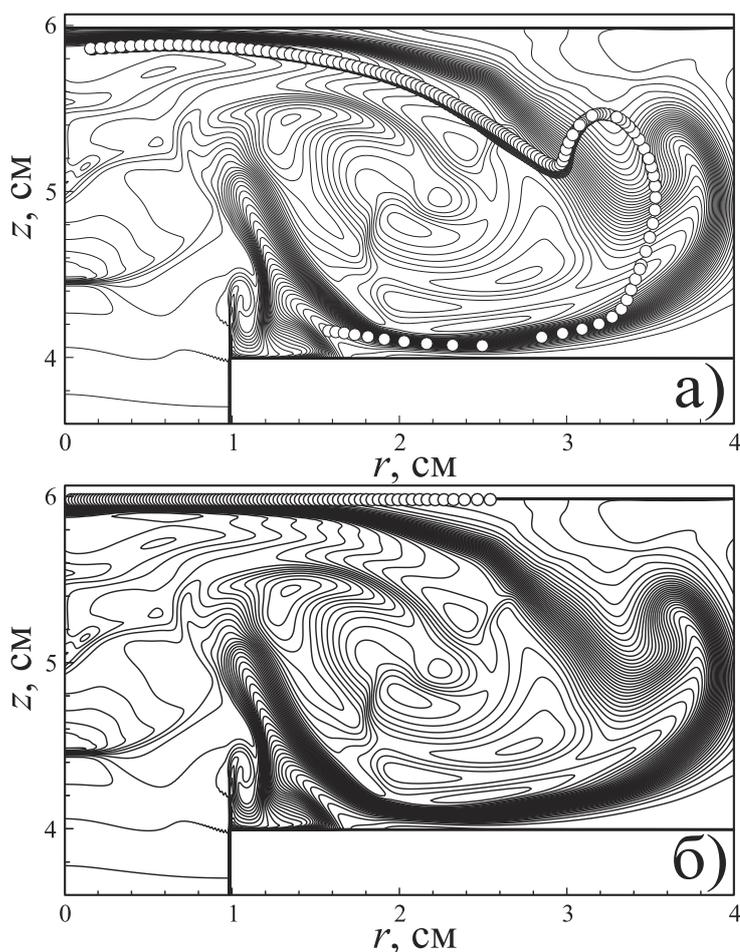


Рисунок 4.8 — Распределение частиц в потоке продуктов детонации в зазоре между срезом сопла и подложкой. а) – частицы размером 1.0 мкм, б) – 100.0 мкм. Распределение частиц в потоке отображено маркерами (кружками), концентрация которых пропорциональна объемной плотности облака микрочастиц. Сгущение изолиний соответствует контактному разрыву между продуктами детонации и воздухом,  $r$  – расстояние по радиусу от оси канала,  $z$  – расстояние вдоль оси канала от начала расчетной области,  $z = 4$  см – положение среза сопла.

этом случае становится актуальной проблема снижения воздействия на частицы газодинамических возмущений в зазоре между срезом сопла и подложкой, вызванных отраженной ударной волной. Одним из способов уменьшения влияния газодинамических возмущений и увеличения полезного расхода частиц является подбор пространственной ориентации подложки. Так, в дополнительно проведенных расчетах, как с вогнутыми, так и с выпуклыми профилями подложки было получено повышение эффективности имплантации мелких частиц размером 10 мкм по сравнению с достижимой при нанесении их на плоскую подложку.

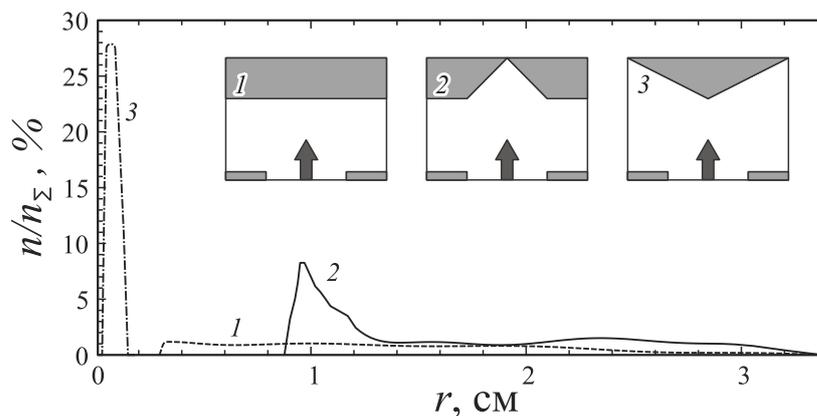


Рисунок 4.9 – Распределение осевших частиц вдоль поверхности подложки, отнесенных к полному числу осевших частиц. Расстояние  $r$  отсчитывается от оси сопла. Штриховая линия 1 – плоская подложка, сплошная линия 2 – угол между осью сопла и поверхностью подложки  $45^\circ$ , наклонная часть подложки переходит в горизонтальную, образуя выпуклый угол ( $135^\circ$ ), при  $r = 1$ ; штрихпунктирная линия 3 – угол между осью сопла и выпуклой поверхностью подложки  $60.5^\circ$ . На врезках схематично показана геометрия подложки в 3 приведенных случаях.

ку, что видно из рис. 4.9. При отражении ударной волны от профилированной мишени вблизи выпуклых элементов профиля на ранних стадиях наблюдается полное обтекание такого элемента ударной волной. В результате локально отраженная волна несет меньший импульс, что позволяет частицам диаметром около 10 мкм достигать поверхности и увеличивает вероятность их оседания вблизи выпуклых элементов профиля поверхности подложки. Статистический анализ показал, что количество осевших частиц вблизи выпуклого элемента профилированной подстилающей поверхности оказывается больше, когда ведущая ударная волна натекает по нормали к вершине угла близкого к  $120^\circ$ . Заметим также, что в случае профилированной подложки осаждение происходит непосредственно после достижения ведущей ударной волной поверхности, что значительно уменьшает время нахождения частиц в потоке и соответственно их разогрев. Так, в описанной выше постановке в случае плоской подложки осаждение происходит через 80 мкс после выхода детонации из сопла канала, в то время как профилированную подложку микрочастицы достигают на 60 мкс ранее.

Таким образом, показано, что наибольшую эффективность имеет процесс имплантации крупных частиц ( $\sim 100$  мкм и более). При этом можно выделить околопредельные режимы имплантации с размерами частиц порядка 10 мкм, полезный расход для которых при нанесении их на плоскую подложку весьма низок из-за неустойчивости к газодинамическим возмущениям в области между срезом сопла и подложкой. Обнаружено, что для микрочастиц размерами порядка 1.0 - 10.0 мкм профилирование поверхности подложки приводит к существенному повышению удельной концентрации осевших частиц вблизи выпуклых элементов подложки.

### 4.3 Основные результаты.

В настоящей главе путем численного моделирования проведен анализ режимов воспламенения газовых смесей путем нагрева взвешенных в среде частиц от внешнего источника теплового излучения. В частности, детально рассмотрены условия формирования детонационного горения в смеси при воздействии источника излучения на облако частиц конечной протяженности. Выявлены основные физические механизмы и определены критерии формирования детонации, что может служить основой дальнейшей разработки систем инициирования горения в технических устройствах, работающих на принципе детонационного цикла сжигания топлива.

Также проведен анализ методики детонационного напыления микрочастиц на твердотельную подложку. Проанализировано влияние возвратных течений на микрочастицы различного размера. Показано, что наибольшая эффективность напыления достигается при использовании частиц с размерами порядка 100 мкм. Из полученных результатов также следует, что для напыления частиц со средним диаметром порядка 10 мкм, одним из методов, существенно повышающих результативность детонационного напыления, является специальное профилирование поверхности, обеспечивающее условия для минимизации встречных потоков. Обнаруженные способы оптимального профилирования поверхностей могут быть использованы при создании современных наноструктурных материалов с помощью детонационного напыления частиц.

## **Глава 5. Использование метода КАБАРЕ для решения задач газодинамики горения и детонации**

Данная глава посвящена анализу преимуществ использования современного бездиссипативного вычислительного метода КАБАРЕ для решения задач газодинамики горения и детонации. Для демонстрации возможностей метода КАБАРЕ предложен ряд тестовых задач и проведено сравнение результатов с классическим эйлерово-лагранжевым методом "крупных частиц".

### **5.1 Адаптация метода КАБАРЕ для расчетов газодинамических потоков в реагирующих средах.**

В разделе 2.1 был кратко описан Эйлерово - Лагранжев метод (ЭЛМ), использованный автором настоящей диссертации и в ряде работ других авторов для компьютерного моделирования процессов горения, и были приведены ссылки на многочисленное тестирование этого метода на предмет его применимости к задачам горения газовых смесей и газовзвесей. Как результаты тестовых задач, так и накопленный опыт моделирования двухмерных и трехмерных процессов горения и детонации показали, что ЭЛМ на достаточно подробных расчетных сетках (с шагом порядка и менее 0.1 ширины фронта пламени) с хорошей степенью точности воспроизводит основные особенности возникновения и развития волн горения и ведущие механизмы, определяющие переход от дефлаграционного горения к детонации. В частности метод обеспечивает хорошее согласие расчетных данных с экспериментами по нормальной скорости ламинарного пламени, по ширине фронта пламени, по концентрационным пределам дефлаграционного горения, по скорости детонационной волны и величине параметров в точке Чепмена-Жуге. Так же достаточно хорошо воспроизводятся сценарии развития гидродинамической неустойчивости фронта пламени

Ландау-Дарье, перехода горения в детонацию в гладких и загроможденных каналах, сценарий развития спонтанной волны горения на градиенте температуры, в очагах энерговыделения и за ударными волнами. В то же время проведенные вычислительные эксперименты показали, что такие тонкие эффекты, как эволюция акустических и вихревых полей и мелкомасштабная структура течений при разумном (по времени проведения расчета) выборе размеров расчетных ячеек проявляется в весьма сглаженном виде из-за схемной вязкости, присущей этому методу. Таким образом, можно заключить, что физические процессы, развивающиеся на пространственно-временных масштабах больших масштабов развития остаточных членов выбранной разностной схемы удовлетворительно описываются с использованием схемы ЭЛМ второго порядка точности по пространству. В то же время, когда принципиальными становятся процессы, развивающиеся на меньших масштабах, возникает необходимость в физически обоснованной технологии подавления влияния остаточных членов. Традиционный путь воспроизведения этих эффектов на количественном уровне с большей степенью достоверности связан с переходом к схемам более высокого порядка точности.

Наиболее широко распространенными методами высокого порядка являются существенно не осциллирующие схемы (WENO схемы) и разрывной метод Галёркина [132]. Несмотря на многочисленные примеры использования данных схем для решения задач физики горения [133–135], эти схемы имеют существенные недостатки. Схемы высокого порядка класса WENO имеют большие сеточные шаблоны, размеры которых возрастают при увеличении порядка точности. В связи с этим увеличивается как вычислительная стоимость расчета, так и объем межпроцессорных коммуникаций необходимый для параллельного решения задач на кластерных многопроцессорных системах с распределенной памятью. Метод Галёркина также является вычислительно ресурсоемким. В обоих классах методов, для обеспечения высокой точности получаемых решений, необходимо использование искусственных процедур ограничителей. Жесткость выбора корректирующих процедур при решении конкретного класса задач определяет неэффективность таких схем высокого порядка точности при расчете более

широкого класса задач и нестационарных процессов, характеризующихся сменой режимов течения в рамках одной задачи. Приведенные негативные особенности данных методов могут серьезно сказаться на вычислительной стоимости и точности решения, что принципиально при решении нестационарных задач горения на больших временных и пространственных масштабах.

Альтернативным подходом к повышению качества численного моделирования сложных многомасштабных течений является разработка принципиально бездиссипативных вычислительных методов не высокого порядка точности, но существенно понижающих негативное влияние остаточных членов за счёт специально построенной конечно-разностной аппроксимации физических потоков на расчетных сетках. Такой подход может быть более перспективным при детальном моделировании процессов горения и взрыва. Одним из примеров алгоритма, разработанного в рамках данной идеологии, является схема КАБАРЕ, уже зарекомендовавшая себя при решении широкого круга задач динамики нейтральных газов [136].

Разработка схемы КАБАРЕ берет свое начало от работ Айзерлиса по обобщению классического метода «чехарда» для решения гиперболических уравнений [137]. В рамках данной работы Айзерлисом была получена трехслойная по времени и двухслойная по пространству схема upwind leapfrog имеющая второй порядок аппроксимации. Параллельно В.М. Головизниным и А.А. Самарским была получена аналогичная схема [138], которая и была первоначально названа схемой КАБАРЕ. Проведенный ими детальный анализ данной схемы показал, что схема является консервативной, бездиссипативной, является устойчивой в диапазоне чисел Куранта от нуля до единицы и точной при числах Куранта 0.5 и 1, а также обладает уникальными дисперсионными свойствами [138; 139]. Впоследствии была получена двухслойная форма представления данной схемы, которая не является формальным следствием схемы Айзерлиса [140]. Двухслойность схемы обеспечивается за счет введения так называемых “поточных” переменных, определенных на границах расчетных ячеек. Именно такая двухслойная и консервативная форма на сегодняшний день носит название схе-

мы «КАБАРЕ». Наряду с “потокowymi” переменными в схеме КАБАРЕ также используются значения параметров потока в центрах расчетных ячеек, или так называемые “консервативные” переменные. Однако необходимо отметить, что разделение физических величин на “потокowe” и “консервативные” носит формальный характер и подразумевает только конкретизацию области определения соответствующей физической величины на расчетной сетке.

Двухслойное балансно-характеристическое представление схемы КАБАРЕ с учетом нелинейной коррекции потокowych величин [140; 141] показало свой потенциал при решении систем уравнений законов сохранения газовой динамики [136]. В частности высокая точность и эффективность решения по сравнению со схемами класса WENO и TVD была получена на классических газодинамических тестах Blast wave [142] и задаче Чу-Ошера [143]. Данное представление схемы КАБАРЕ сегодня с успехом используется для решения широкого круга практических задач моделирования многомерных задач аэроакустики [144; 145] и океанологии [146].

В рамках данной работы была предложена методика адаптации балансно-характеристической схемы КАБАРЕ для решения системы уравнений газовой динамики в дивергентном виде 1.1-1.4, моделирующих газодинамические потоки в многокомпонентных смесях, описываемых реальными уравнениями состояния 1.5-1.6с учетом нестационарного энерговыделения в ходе химических превращений, многокомпонентной диффузии, вязкости и теплопроводности среды. Ранее возможность применения метода КАБАРЕ для моделирования нестационарных течений в многокомпонентных смесях идеальных газов была продемонстрирована в [147].

Исходная система гиперболических дифференциальных уравнений 1.1-1.4 может быть представлена в так называемой характеристической форме [148]. Локально-одномерная характеристическая форма в направлении оси  $Ox$  для системы 1.1-1.4 выглядит следующим образом:

$$\left( \Omega_x \cdot \frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial t} \right) + \Lambda_x \cdot \left( \Omega_x \cdot \frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial x} \right) = \Omega_x \cdot \left( \vec{f} + \vec{f}_y + \vec{f}_z \right) \quad (5.1)$$

где  $\vec{\varphi}^T = (Y_1, \dots, Y_N, \rho, u_x, u_y, u_z, p)$  - вектор, составленный из искоемых параметров потока,  $\vec{f}^T = \left( \frac{F_{Y_1}}{\rho}, \dots, \frac{F_{Y_N}}{\rho}, 0, \frac{F_{u_x}}{\rho}, \frac{F_{u_y}}{\rho}, \frac{F_{u_z}}{\rho}, \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \varepsilon} (F_E - u_x F_{u_x} - u_y F_{u_y} - u_z F_{u_z}) \right)$ ,  $\vec{f}_y = -A_y \frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial y}$ ,  $\vec{f}_z = -A_z \frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial z}$ .

Матрицы  $\Omega_x$ ,  $\Lambda_x$ ,  $A_y$  и  $A_z$  в рассматриваемом случае имеют следующий вид:

$$\Omega_x = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1/\rho c \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1/\rho c \\ 0 & \dots & 0 & -c^2 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

$$A_y = \begin{pmatrix} u_y & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & u_y & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & u_y & 0 & \rho & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & u_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & u_y & 0 & 1/\rho \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & u_y & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & c^2 \rho & 0 & u_y \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

$$A_z = \begin{pmatrix} u_z & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & u_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & u_z & 0 & 0 & \rho & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & u_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & u_z & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & u_z & 1/\rho \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 \rho & u_z \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

Слагаемые  $F_Y$ ,  $F_u$ ,  $F_E$  представляют собой вклады в соответствующие параметры потока связанные с эффектами вязкости, молекулярной диффузии и теплопроводности и могут быть найдены из следующих соотношений:

$$\begin{aligned} F_{Y_k} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D_k (T) \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) \\ F_{u_i} &= \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} \\ F_E &= \frac{\partial}{\partial x_i} (u_j \sigma_{ji}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \kappa (T) \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \end{aligned}$$

Локально-одномерные характеристические формы в направлениях осей  $0y$  и  $0z$  находятся из аналогичных соотношений.

В соответствии с принципом расщепления по физическим процессам учет изменения полной энергии смеси и концентраций компонент за счет химических реакций осуществлялся без учета конвекции, после вычисления окончательных параметров потока на временном шаге.

Для нахождения скорости звука в многокомпонентной смеси газов из уравнений состояния 1.5–1.6 могут быть записаны в следующей форме:  $p = (\gamma - 1)\rho\varepsilon$ ,  $\gamma = 1 + \frac{nR}{c_V}$  где  $\gamma$  – показатель адиабаты. В этом случае скорость звука находится из соотношения  $c = \sqrt{\frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \frac{p}{\rho^2} + \frac{\partial p}{\partial \rho}} = \sqrt{\gamma \frac{p}{\rho}}$ . С учетом представленных соотношений, следуя общей концепции решения системы уравнений газовой динамики в переменных Эйлера опишем процедуру поиска решения в рамках метода балансно-характеристической схемы КАБАРЕ [136]. Начальными данными на каждом временном шаге являются значения параметров потока  $(\rho, p, u, E, Y, T)$ , определенных как в центрах расчетных ячеек (“консервативные” переменные),

так и на границах расчетных ячеек (“потокосые” переменные), найденные на предыдущем шаге или из постановки начальных условий. Для нахождения параметров потока на новом временном слое используется следующая последовательность этапов расчетного алгоритма:

1. На первом этапе консервативная форма исходной системы уравнений 1.1–1.4 аппроксимируется явной конечно-разностной системой уравнений второго порядка точности для нахождения “консервативных” переменных на полуцелом шаге по времени.
2. Из уравнений состояния находится поле скоростей звука в центрах расчетных ячеек 1.5–1.6, необходимое для проведения дальнейших процедур коррекции.
3. Найденные значения “консервативных” переменных на полуцелом шаге и характеристическая форма исходной системы 5.1 используются для нахождения локальных квазиинвариантов Римана.
4. С учетом принципа максимума [148] производится коррекция найденных инвариантов. Новые значения “потокосых” переменных на временном шаге вычисляются как результат переноса скорректированных квазиинвариантов вдоль характеристик.
5. Недостающие значения “потокосых” переменных на новом временном шаге вычисляются из уравнения состояния.
6. Окончательные значения консервативных переменных на новом временном слое рассчитываются при помощи неявной конечно-разностной аппроксимации исходной системы уравнений со вторым порядком точности. Расчет по неявной схеме становится возможным, так как на данном этапе новые значения “потокосых” величин уже известны.

## 5.2 Решение тестовых задач физики горения и детонации методом КАБАРЕ.

Для качественной оценки метода КАБАРЕ для моделирования нестационарных процессов горения в рамках настоящей диссертации был рассмотрен набор одномерных и двухмерных тестовых задач, акцентирующих внимание на различных аспектах эволюции газодинамических потоков, развивающихся за счет энерговыделения внутри зоны реакции. Первостепенную важность для корректного моделирования процессов горения имеет точное воспроизведение параметров дозвуковых и сверхзвуковых газодинамических течений. В связи с этим в качестве первой задачи была рассмотрена классическая задача Римана о распаде произвольного разрыва в ударной трубе, заполненной смесью реальных газов. Не менее важным является воспроизведение структуры зоны реакции и основных характеристик распространения ламинарного пламени, таких как ширина пламени и нормальная скорость горения. Наконец, необходим детальный анализ возможностей численного алгоритма для моделирования сложных газодинамических течений реагирующей смеси включающих в себя ускорение пламени и взаимодействие пламени с тангенциальными разрывами и ударными волнами. Данный анализ был проведен при решении классической задачи Я.Б. Зельдовича о развитии нестационарного теплового взрыва на градиенте времени индукции смеси [89]. Известно, что данная задача имеет несколько различных решений [72; 89], в зависимости от начальных условий. В частности могут быть реализованы следующие основные режимы распространения волны горения: распространение дозвуковой волны реакции в потоке за ведущей ударной волной, ускорение пламени и переход к детонации, и формирование детонации при взаимодействии замедляющейся сверхзвуковой спонтанной волны реакции и следующей за ней ударной волной. Ввиду разнообразия возможных режимов, решение данной задачи позволяет всесторонне изучить возможности вычислительного алгоритма для решения задач нестационарного горения в широком диапазоне начальных условий. В качестве четвертой тестовой за-

дачи, также посвященной вопросу о корректности моделирования переходных режимов горения, была выбрана задача о прямом инициировании детонации от нестационарного источника энерговыделения. Прямое инициирование детонации может быть осуществлено только с помощью источника энергии необходимой интенсивности, определение которой само по себе представляет вопрос большой научно-практической важности. Кроме того, существует экспериментально наблюдаемая особенность протекания процесса при энергии источника близкой к предельной энергии инициирования детонации. Так, вблизи критических значений подводимой энергии, детонация формируется в пересжатом режиме в результате нестационарного процесса ускорения пламени и перехода к детонации, после чего пересжатая детонационная волна релаксирует к параметрам устойчивой самоподдерживаемой детонации [149]. Верное качественное воспроизведение режимов прямого инициирования детонации также может быть дополнительным аргументом при выборе вычислительного алгоритма. Пятая тестовая задача посвящена многомерным расчетам распространения волн горения в замкнутых объемах. В частности, в двухмерной постановке была рассмотрена задача о распространении в канале пламени от локализованного источника воспламенения. Экспериментальные данные показывают, что после воспламенения пламя расширяется практически изотропно вплоть до достижения фронтом пламени стенок канала [150; 151]. В тоже время по мере расширения, на поверхности фронта пламени начинает формироваться ячеистая структура, обусловленная ростом газодинамической неустойчивости фронта пламени. Корректное описание динамики расширения пламени после воспламенения газовой смеси в канале от локализованного источника энергии является показателем точного воспроизведения акустических полей, формируемых при расширении очага горения, а также взаимодействия акустических возмущений с фронтом пламени, так как именно этими процессами обусловлены формирование поля пульсаций давления и рост инкремента неустойчивости.

Все рассматриваемые задачи были решены для смесей на основе водорода, процессы горения в которых наиболее хорошо изучены на сегодняшний день, а

большое количество экспериментальных данных позволяет провести всестороннее сравнение результатов расчетов с экспериментом. Для сравнения результатов, задачи в рассмотренных постановках также были решены с помощью классического эйлерово-лагранжева метода «крупных частиц».

### 5.2.1 Моделирование дозвуковых и сверхзвуковых течений

Для численного воспроизведения дозвуковых и сверхзвуковых потоков была рассмотрена задача о распаде произвольного разрыва. В зависимости от начальной разницы давлений в областях высокого и низкого давлений истечение газа происходит в дозвуковом или сверхзвуковом режиме. В стационарном решении данной задачи ширина контактного разрыва, а также скорость его распространения должны быть постоянны. Отклонения от данного результата могут быть обусловлены только вычислительными погрешностями. Рассмотрим дозвуковой поток, возникающий в канале заполненным воздухом с начальным давлением 2.0 атм в области высокого давления и 1.0 атм в области низкого давления. Скорость формирующегося за ударной волной потока при этом равна 87 м/с. Сверхзвуковой поток в данной постановке формируется при истечении водорода сжатого до 20.0 атм в воздух при 1.0 атм. Поток газа за ударной волной в этом случае имеет массовую скорость 720 м/с, что больше скорости звука в невозмущенной среде, которая в данном случае равна 340 м/с.

На рисунке 5.1 показаны характерные структуры потока вблизи контактного разрыва также для обоих случаев. На рисунке 5.2 представлены графики зависимости ширины контактной поверхности от времени для дозвукового течения и сверхзвукового течений. Из зависимостей на рисунке 5.2 можно заключить, что метод КАБАРЕ, благодаря практически полному отсутствию аппроксимационной вязкости, позволяет избежать интенсивного увеличения ширины контактной поверхности со временем, как в дозвуковом потоке, так и в сверхзвуковом. При

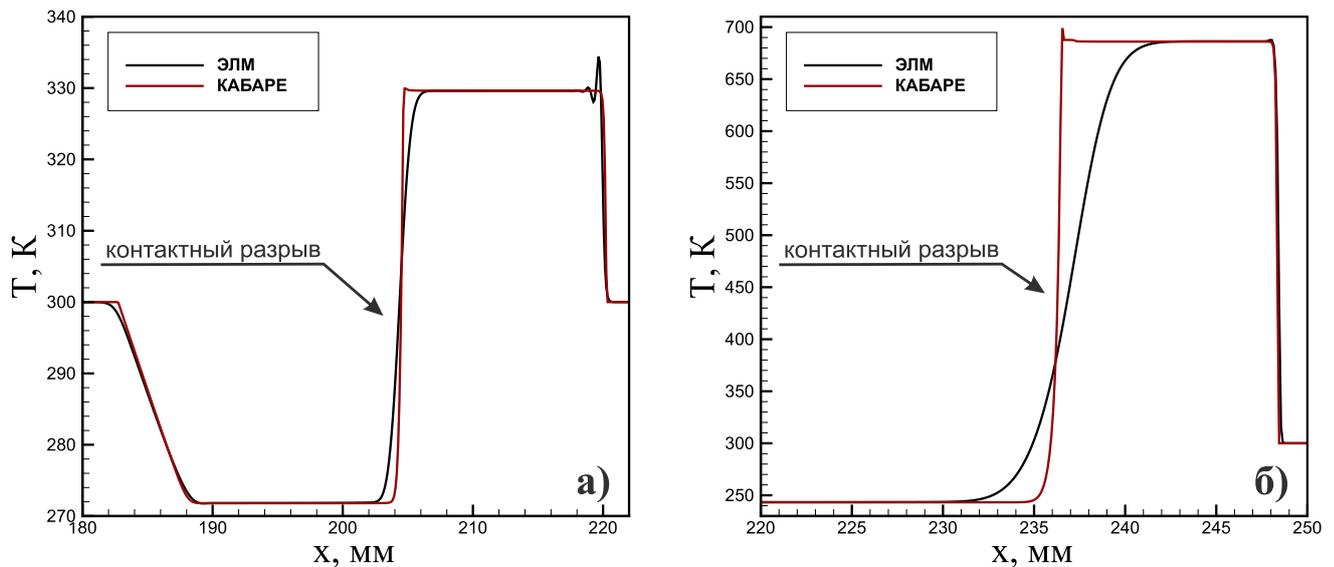


Рисунок 5.1 — Профили температуры в дозвуковом потоке а) и сверхзвуковом потоке б).

использовании метода «крупных частиц» наблюдается расширение контактной поверхности со скоростью приблизительно равной 7.0 м/с. При рассмотрении сверхзвукового потока, звуковая точка расположена непосредственно на контактной поверхности. Скорость звука в сжатом воздухе за ударной волной равна 520.0 м/с, а скорость звука в расширяющемся водороде равна 1200.0 м/с. На начальной стадии процесса истечения водорода, при решении методом КАБАРЕ, возникают малые колебания вблизи контактной поверхности, не превышающие  $3.0 \cdot 10^{-4} \%$  от средних значений температуры и давления перед ударной волной и убывающие со временем. Эти колебания пренебрежимо малы, по сравнению с возникающими на фронте дозвуковой ударной волны при решении методом «крупных частиц» (которые составляют 0.2 %) (см. рис. 5.1).

Представленные результаты показывают преимущества метода КАБАРЕ, главными из которых являются малая аппроксимационная вязкость и отсутствие искусственных осцилляций решения, которые могут серьезно затруднить анализ полученного решения.

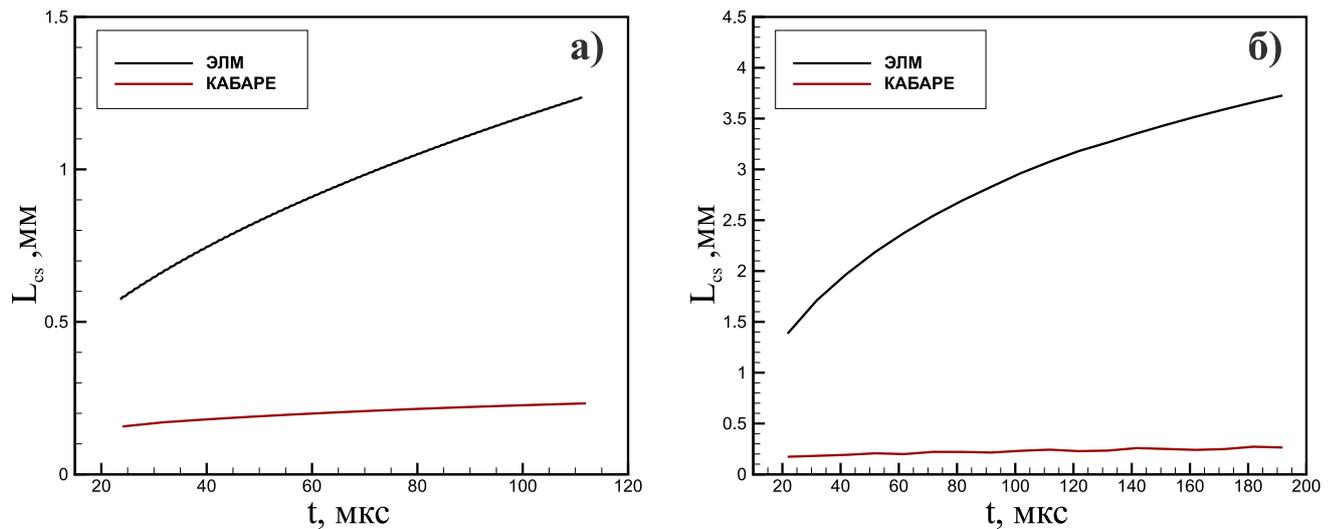


Рисунок 5.2 — Изменение ширины контактной поверхности в дозвуковом потоке а) и в сверхзвуковом потоке б).

### 5.2.2 Распространение ламинарного пламени

Режим ламинарного распространения пламени наблюдается в гладких одномерных полукрытых каналах после воспламенения смеси вблизи торцевой стенки канала источником малой интенсивности. После кратковременного нестационарного развития волны горения, вызванного воспламенением, устанавливается режим стационарного распространения пламени с постоянной скоростью, величина которой определяется энерговыделением во фронте реакции и расширением горячих продуктов горения. Скорость распространения пламени в этом случае может быть оценена, как произведение скорости горения и коэффициента расширения, равного отношению плотностей свежей смеси и продуктов горения  $U_{f,L} = \frac{\rho_f}{\rho_b} u_f$ . Отсюда следует, что нормальная скорость распространения пламени (скорость горения) может быть определена из одномерного решения путем нахождения значений  $U_{f,L}$  и  $\Theta = \rho_f / \rho_b$ .

Постановка задачи для этого теста была сформулирована следующим образом. Пламя инициировалось нагретым слоем заданной ширины (1.0 мм) и температуры (3000.0 K) вблизи торцевой стенки канала. Искомыми величинами

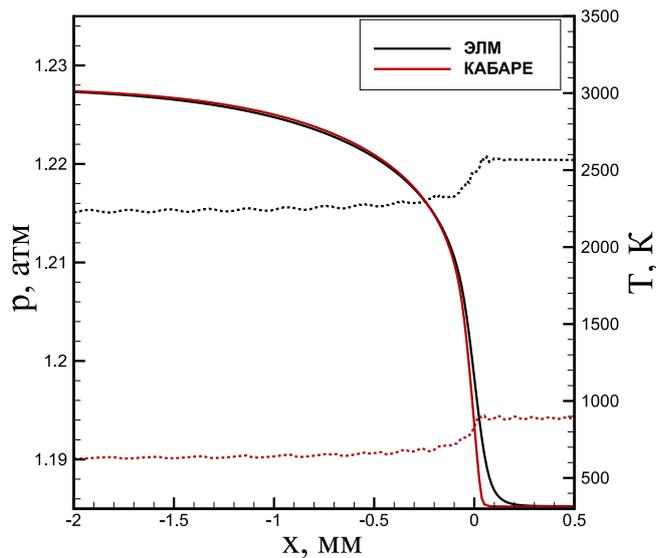


Рисунок 5.3 — Структура стационарного ламинарного пламени. Сплошными линиями обозначены профили температуры, штриховыми линиями обозначены профили давления.

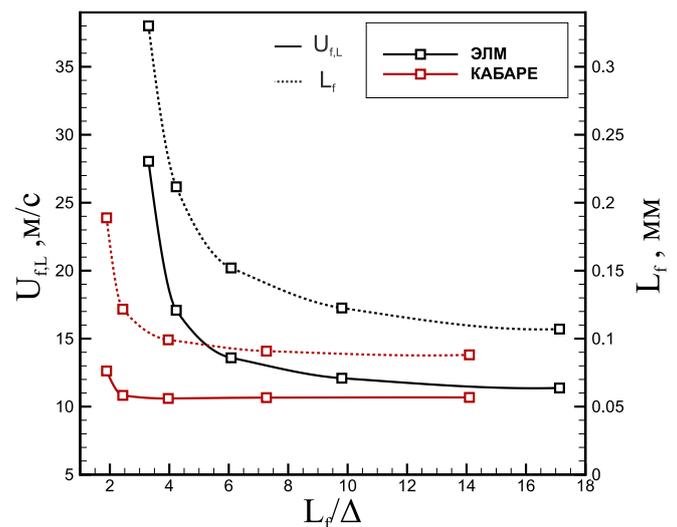


Рисунок 5.4 — Зависимость нормальной скорости горения (сплошные линии) и ширины фронта пламени (штриховые линии) от размера расчетной ячейки.

были скорость распространения пламени в неподвижной системе отсчета  $U_{f,L}$ , скорость горения  $U_f$ , коэффициент расширения, а также ширина фронта пламени равная  $L_f = \frac{(T_b - T_f)}{\max(|\text{grad}(T)|)}$ .

Результаты моделирования стационарного горения представлены на рисунках 5.3, 5.4. На рисунке 5.3 показаны профили давления и температуры вблизи фронта пламени. Результаты, полученные по методам КАБАРЕ и «крупных частиц» на одинаковых расчетных сетках качественно совпадают и показывают тенденцию сходимости к величинам  $U_f = 11$  м/с,  $L_f = 0.1$  мм, что хорошо согласуется с экспериментальными данными [112]. Однако, как это видно из рисунка 5.4, метод КАБАРЕ дает практически вдвое более быструю сходимость решения. Таким образом, для работы в области сходимости решения в случае метода КАБАРЕ возможно брать вычислительные сетки с более крупной расчетной ячейкой, что является ключевым фактором эффективности решения сложных многомерных задач горения, требующих высоких затрат вычислительных ресурсов.

### 5.2.3 Нестационарное развитие теплового взрыва на градиенте температуры.

Рассмотрим следующую постановку задачи, предложенную Я.Б. Зельдовичем [89]. В области занятой горючей газовой смесью в начальный момент времени задается линейный градиент температуры с максимальным значением температуры ( $T^* = 1500$  К), достаточным для воспламенения смеси.

$$T(x) = \begin{cases} T^* - (T^* - T_0)x/L, x < L \\ T_0, x \geq L \end{cases}$$

Здесь  $T_0$  – значение температуры вне заданной неоднородности,  $L$  – линейный масштаб температурного градиента. В соответствии с теорией Я.Б. Зельдовича при наличии такого температурного градиента в смеси, горение происходит в режиме распространения так называемой спонтанной волны реакции, которая представляет собой последовательность независимых воспламенений смеси на градиенте времени индукции смеси. Скорость спонтанной волны может быть оценена как:

$$U_{sp} = |\text{grad}\tau_{ind}|^{-1}$$

В одномерном случае выражение для скорости спонтанной волны может быть представлено в виде:

$$U_{sp} = \left(\frac{d\tau_{ind}}{dx}\right)^{-1} = \left(\frac{d\tau_{ind}}{dT} \frac{dT}{dx}\right)^{-1} = \left(\frac{d\tau_{ind}}{dT} \frac{T^* - T_0}{L}\right)^{-1}$$

где  $\tau_{ind}$  – время индукции смеси, которое в общем случае зависит от температуры, давления и состава смеси и определяется механизмом химической кинетики горения газовой смеси. Различные режимы воспламенения смеси и дальнейшего распространения волны горения могут быть получены при изменении характерного размера градиента температуры  $L$ . В соответствии с классификацией предложенной Я.Б. Зельдовичем при малых величинах  $L$  формируются режимы медленного горения, в то время как при больших  $L$  возникают быстрые режимы горения, такие как детонация и так называемая “слабая” детонация, в предельном случае  $L \rightarrow \infty$  горение протекает в режиме теплового взрыва.

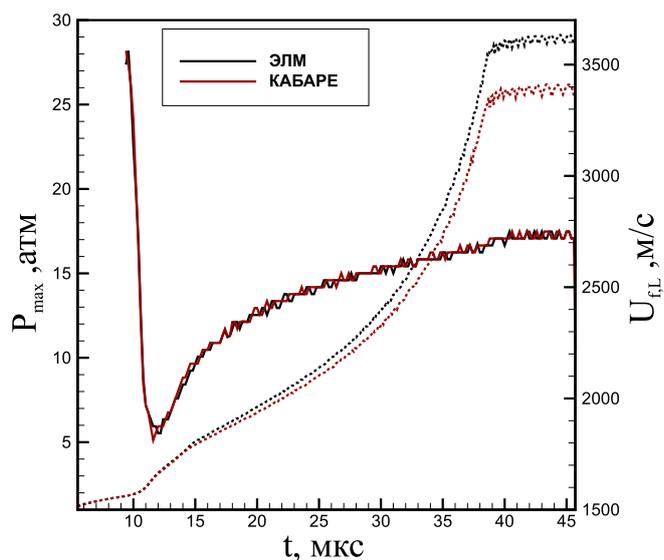


Рисунок 5.5 — Эволюция процесса нестационарного теплового взрыва. Зависимости максимального давления (сплошные линии) и скорости волны горения (штриховые линии) от времени.

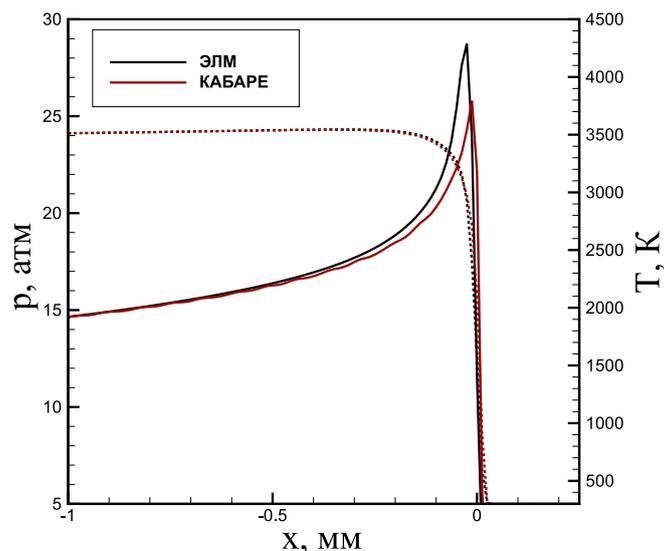


Рисунок 5.6 — Структура стационарной детонационной волны. Сплошными линиями обозначены профили давления, штриховыми – профили температуры.

На рисунке 5.5 представлены результаты проведенных тестовых расчетов по методу КАБАРЕ и методу ЭЛМ. Длина температурного градиента задавалась равной 8.0 см, что соответствует условию формирования самоподдерживаемой детонационной волны в результате процесса нестационарного ускорения волны реакции в потоке за ведущей ударной волной. Структура детонационной волны представлена на рисунке 5.6. Решения, полученные по обоим методикам, при использовании одинаковых расчетных ячеек с размерами в пределах области сходимости решения, практически совпадают. Полученный результат обоснован тем, что развитие волны горения на градиенте температуры главным образом определяется свойствами химической кинетики горения смеси и в меньшей степени зависит от газодинамических процессов. Наибольшее различие при сравнении результатов наблюдается в параметрах в точке Неймана стационарной детонационной волны, которые представлены в таблице 2. Параметры в точке Чепмена-Жуге детонационной волны даны в таблице 3.

Таблица 2 — Параметры в точке Неймана стационарной детонационной волны.

Метод	$U_{vN}$	$p_{vN}$	$T_{vN}$	$c_{vN}$
КАБАРЕ	1942.9	26.17	2453.12	1388.54
ЭЛМ	2023.3	29.54	2899.18	1483.01

Таблица 3 — Параметры в точке Чепмена-Жуге стационарной детонационной волны.

Метод	$D_{CJ}$	$P_{CJ}$	$T_{CJ}$	$c_{CJ}$	$M_{CJ}$
КАБАРЕ	2730	21.45	3388.4	1532.7	5.065
ЭЛМ	2730	21.72	3451.2	1541.9	5.065

#### 5.2.4 Прямое инициирование детонации.

Постановка тестовой задачи о прямом инициировании детонации аналогична постановке уже рассмотренной задачи о ламинарном распространении пламени. Основным различием является большая величина энергии сообщаемой смеси при воспламенении. В данном случае детонация была инициирована нестационарным источником энерговыделения в плоском слое шириной 1.0 мм вблизи торцевой стенки канала. Длительность работы источника задавалась равной 0.1 мкс. Прирост энергии со временем описывался линейной зависимостью, в соответствии с тем как это было предложено в [71]. Как было замечено ранее, возможно наблюдение следующих трех различных режимов развития процесса в зависимости от величины вкладываемой энергии: прямое инициирование детонационной волны интенсивной ударной волной, возникающей на границе области энерговыделения; формирование детонации в результате нестационарного процесса ускорения пламени за ударной волной; возникновение быстрой, но постепенно замедляющейся волны дефлаграционного горения.

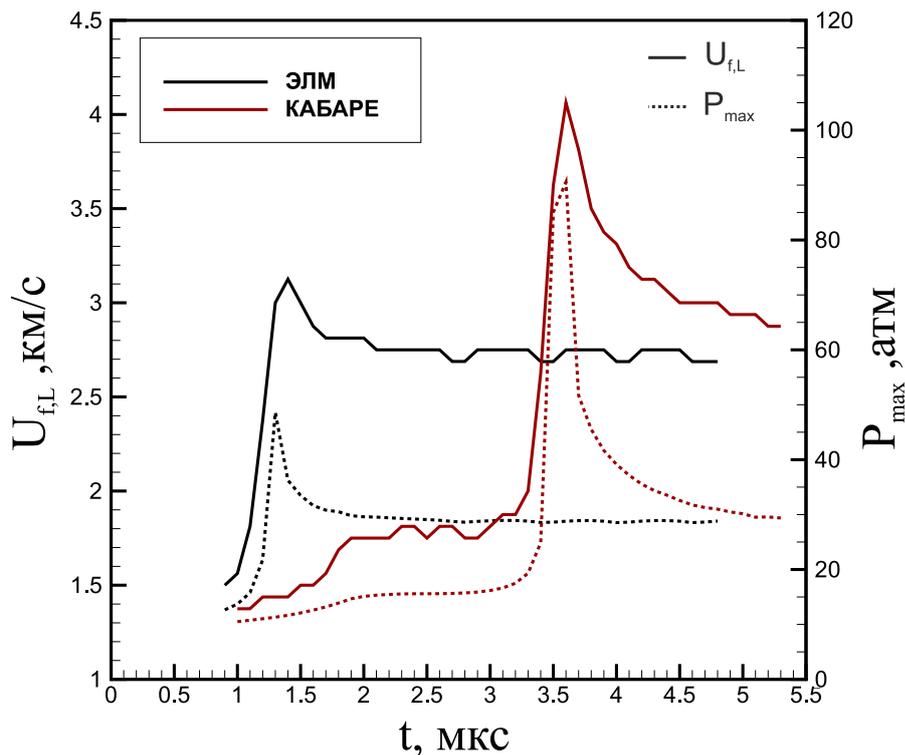


Рисунок 5.7 — Эволюции максимального давления (штриховые линии) и скорости волны реакции (сплошные линии) во времени при воспламенении смеси нестационарным источником энерговыделения мощностью  $7.2 \text{ кДж/м}^2$ .

Газодинамические явления играют принципиальную роль в процессе формирования детонации от локализованного источника воспламенения. В связи с этим различия решений полученных разными методами проявляются более наглядно. Так, энергетический предел формирования детонации при использовании метода КАБАРЕ составляет  $7.2 \text{ кДж/м}^2$ , в то время как при решении ЭЛМ критическая энергия инициирования ниже и составляет  $2.9 \text{ кДж/м}^2$ . Рассмотрим эволюцию процесса в случае сообщения смеси в области источника энергии равной  $7.2 \text{ кДж/м}^2$  (см. рис. 5.7). При использовании ЭЛМ развитие процесса происходит по следующему сценарию: в результате распада разрыва на границе области источника энерговыделения формируется ударная волна, а также следующая за ней волна реакции. Завышение значения ширины фронта пламени из-за эффектов схемной вязкости по сравнению с методом КАБАРЕ ведет к искусственному сцеплению фронтов реакции и ударной волны и мгновенному формированию детонации. В то же время бездиссипативный метод КАБАРЕ позво-

ляет более детально разрешить фронт ударной волны и следующий за ней фронт пламени и избежать искусственного формирования детонационного комплекса. При использовании метода КАБАРЕ инициирование детонации происходит в результате развития нестационарного процесса ускорения пламени и перехода к детонации, с формированием пересжатой детонационной волны и последующей релаксацией к параметрам самоподдерживаемой детонации.

### **5.2.5 Распространение пламени в ограниченном объеме от локализованного источника воспламенения.**

В рамках постановки нестационарной двухмерной задачи о распространении пламени от локализованного источника воспламенения была рассмотрена динамика пламени в плоском полуоткрытом канале заданной ширины и протяженности. Инициирование пламени задавалось в нагретой круговой области, расположенной на оси канала на расстоянии от закрытого торца канала, равном полуширине канала (начальное положение и конфигурация источника воспламенения показана на рисунке 5.8 закрашенной областью). Такая постановка задачи соответствует типичной постановке лабораторного эксперимента, где инициирование горения производится в электродном промежутке на оси канала. При этом плоскость электродов, как правило, вынесена на расстояние порядка полуширины или ширины канала от его закрытого торца. Изолиниями температуры ( $T = 3000$  К) на рисунке 5.8 представлены положения поверхности фронта пламени, полученные на момент времени  $t = 145$  мкс при использовании вычислительных методов КАБАРЕ и ЭЛМ. Из полученных результатов можно заключить, что за счет высокой схемной вязкости ЭЛМ, поле акустических возмущений и характер его взаимодействия с фронтом пламени воспроизводятся не корректно. В частности искажается спектр пульсаций давления вблизи фронта пламени, что определяет особенности распространения фронта пламени при движении

к закрытой стенке канала. Рассмотрим более подробно эволюцию пламени и поля акустических возмущений в ограниченном объеме (канале). Источником акустических возмущений, как это уже было отмечено в главе 3, является само нестационарное пламя. Возмущения распространяются внутри ограниченного объема, отражаются от стенок и оказывают влияние не структуру потока и эволюцию фронта пламени. Именно такого рода воздействие со стороны акустических возмущений приводит к формированию ячеистой структуры фронта пламени. В среде между фронтом пламени и стенками канала происходит взаимодействие между падающими и отраженными акустическими волнами. Таким образом, происходит формирование поля пульсаций давления и, как следствие, скорости. При распространении пламени по возмущенной среде пламя способно развивать большую скорость распространения на меньших временных масштабах. Помимо этого, возрастает инкремент газодинамической неустойчивости фронта пламени, так как формирующиеся пульсации насыщают спектр возмущений фронта быстрорастущими коротковолновыми гармониками. В результате этого, в натурных экспериментах можно наблюдать большую, чем в расчете, скорость распространения пламени в направлении стенок канала и формирование более развитой ячеистой структуры. Амплитуда изменения давления в поле пульсаций весьма мала и вычислительные методики с высокой величиной схемной вязкости не позволяют воспроизвести указанный эффект.

При использовании вычислительного алгоритма с меньшей схемной вязкостью описанный эффект эволюции акустических полей и их взаимодействия с фронтом пламени воспроизводится более достоверно. В достаточно широких каналах с шириной 20 мм при использовании метода КАБАРЕ была получена более точная структура поля акустических возмущений и как следствие более развитая структура фронта пламени (см. рис. 5.8). Это в свою очередь определило большую скорость распространения пламени в направлении стенок канала, более интенсивное сгорание смеси и соответствующий рост скорости распространения пламени вдоль оси канала. При рассмотрении подобного процесса в более узком канале влияние описанного эффекта и соответствующее развитие

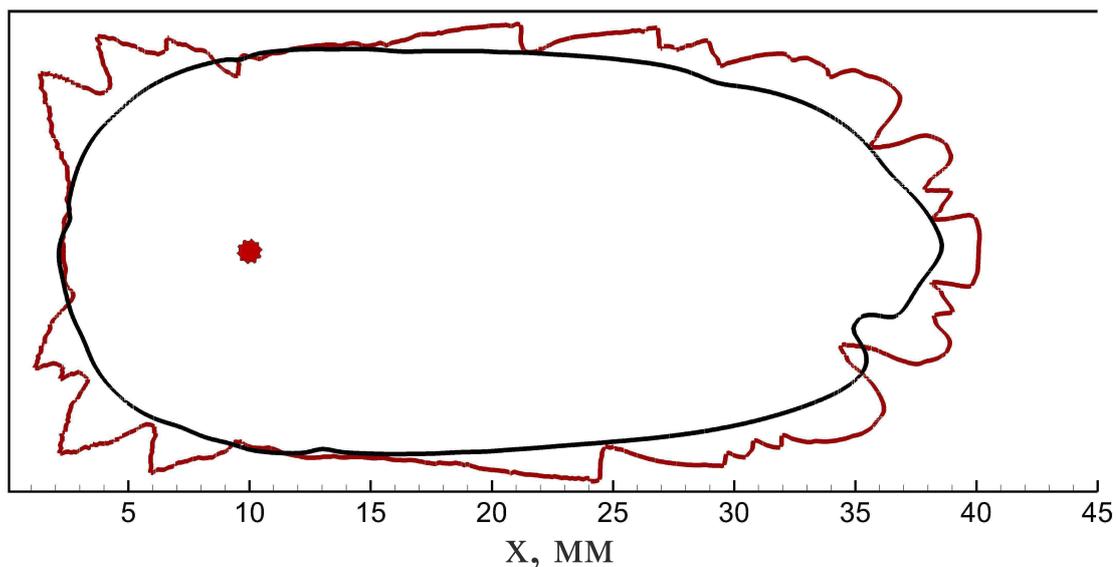


Рисунок 5.8 — Топология фронта пламени в плоском канале шириной 20 мм, распространяющегося от локализованного на оси канала источника воспламенения (источник воспламенения обозначен закрашенной красным областью). Приведено сравнение двух изолиний температуры  $T = 3000$  К на момент времени  $t = 145$  мкс по двум различным вычислительным методикам: черная линия – ЭЛМ, красная метод КАБАРЕ.

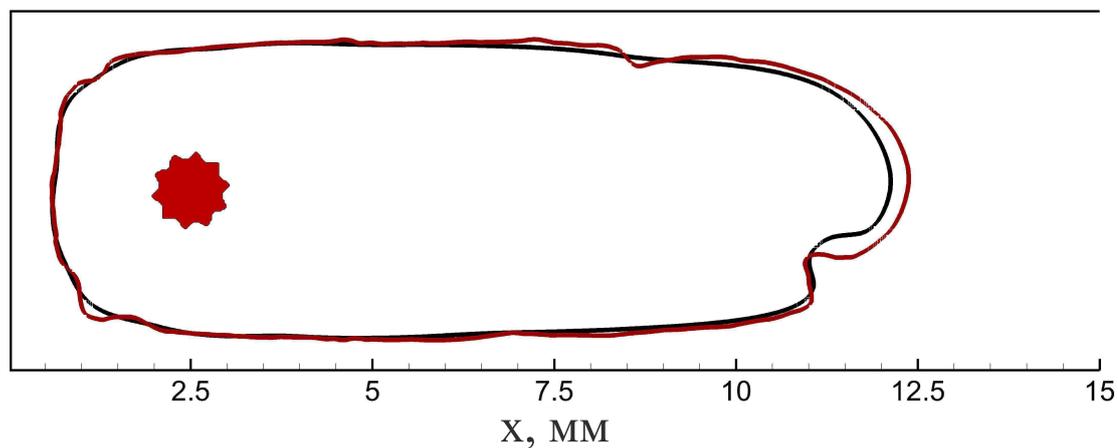


Рисунок 5.9 — Топология фронта пламени в плоском канале шириной 5 мм, распространяющегося от локализованного на оси канала источника воспламенения (источник воспламенения обозначен закрашенной красным областью). Приведено сравнение двух изолиний температуры  $T = 3000$  К на момент времени  $t = 47.5$  мкс по двум различным вычислительным методикам: черная линия – ЭЛМ, красная метод КАБАРЕ.

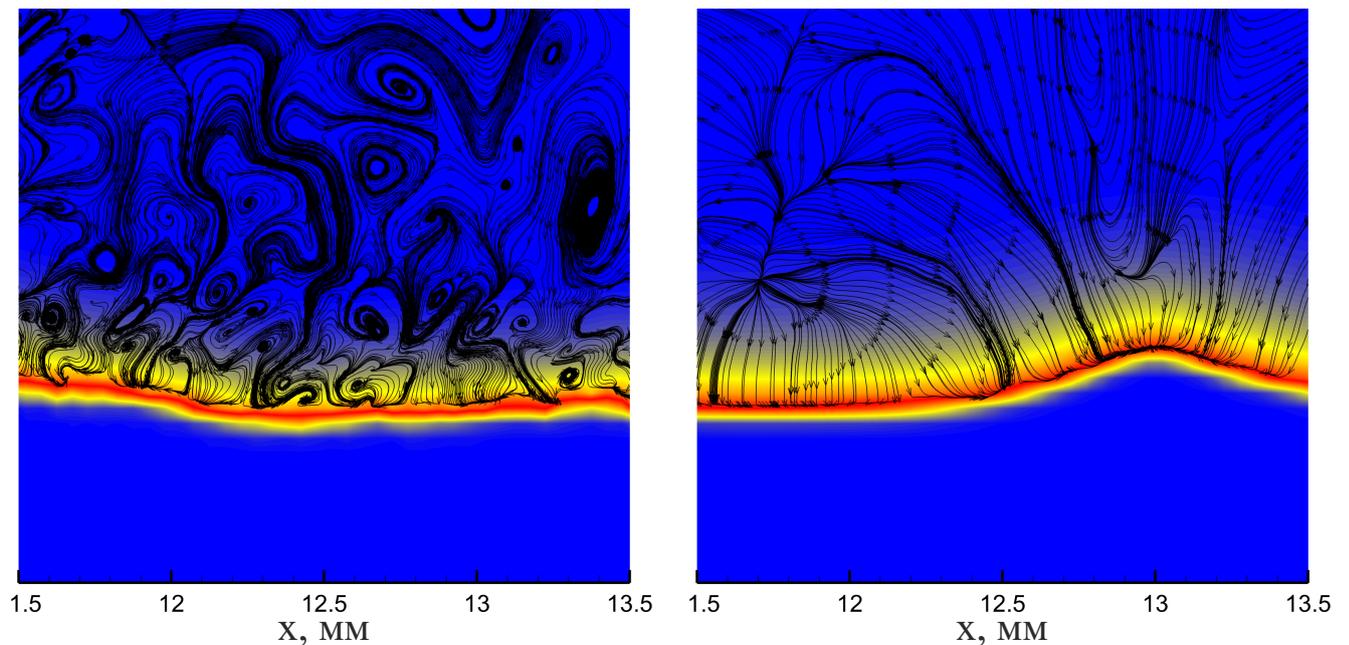


Рисунок 5.10 — Сравнение структуры потока в окрестности элемента поверхности фронта пламени, подходящего к нижней боковой стенке при расчете по методу КАБАРЕ (слева) и ЭЛИМ (справа).

поверхности фронта пламени снижается за счет того, что до момента торможения фронта возвратными течениями формируемыми при отражении акустических волн от боковых стенок канала, описанные выше процессы не успевают развиться в полной мере. На рисунке 5.9 для сравнения приведен расчет в канале шириной 5 мм. Рисунок 5.10 показывает структуру течения в окрестности элемента поверхности пламени при его распространении в непосредственной близости к боковой стенке канала. В случае расчета по бездиссипативному вычислительному алгоритму более развитая структура поля акустических возмущений определяет более насыщенный спектр коротковолновых возмущений на поверхности фронта пламени, что отражается на развитии гидродинамической неустойчивости фронта пламени на коротковолновых масштабах и генерации вихревых возмущений в потоке продуктов горения за фронтом.

### 5.3 Основные результаты.

В настоящей главе описана процедура адаптации метода КАБАРЕ для решения многомерных задач газодинамики реагирующих потоков. Оценка возможностей и преимуществ разработанной методики была получена путем сравнения результатов решения тестовых задач с классическим эйлерово-лагранжевым методом “крупных частиц”. Предложенный набор тестовых задач охватывает основные принципиальные особенности развития газодинамических течений при распространении волн горения в многокомпонентных газовых смесях. На основе полученных данных было показано, что благодаря низкой схемной диссипации метод КАБАРЕ в ряде случаев позволяет избежать возникновения нефизических эффектов, в частности, таких как искусственное «сцепление» фронта пламени и ударной волны и формирование детонации, наблюдаемое при использовании более диссипативного метода “крупных частиц” при решении задачи о прямом инициировании детонации. Более точное воспроизведение методом КАБАРЕ структуры поля акустических возмущений и спектра пульсаций давлений в двухмерном замкнутом объеме позволяет наблюдать более интенсивное развитие ячеистой структуры фронта пламени и изотропное расширение очага горения в замкнутом объеме, подтверждаемое натурными экспериментами.

## Заключение

В заключении сформулируем основные результаты работы:

1. Проведено трехмерное численное моделирование процессов ускорения пламени и перехода к детонации в канале с использованием детальных моделей химической кинетики, табличных уравнений состояния и с учетом зависимости коэффициентов переноса от состояния смеси. Полученные результаты трехмерных расчетов полностью воспроизвели предложенный ранее на основе результатов двухмерных расчетов механизм перехода к детонации и выявили особенности процесса перехода к детонации, наблюдаемые при 3-х мерном моделировании, включающие скорость перехода к детонации, структуру течений и их отображение на двумерных проекциях.
2. На основе результатов трехмерного моделирования, а также данных вспомогательных двухмерных расчетов определена роль волн сжатия излучаемых при распространении пламени в канале в формировании процессов ускорения пламени и перехода к детонации ускорения пламени и перехода к детонации.
3. При помощи детального численного моделирования выявлены основные стадии формирования и структура зоны горения в ограниченных объемах, заполненных бедными смесями водорода с воздухом, близкими по составу к концентрационному пределу воспламенения, и определен ведущий физический механизм распространения пламени в таких смесях, обусловленный конвективным переносом очагов горения.
4. На основе численного моделирования описана динамика развития волн горения, инициированных лучистым нагревом от внешнего источника излучения инертных микрочастиц, взвешенных в горючей газовой смеси. Предложен новый подход к инициированию детонации в газовых смесях на малых пространственных масштабах, основанный на лучи-

стом нагреве локального облака химически нейтральных микрочастиц в горючей газовой среде, и получены критерии реализации такого детонационного режима.

5. На вычислительном эксперименте проанализирован процесс напыления микрочастиц, движущихся в потоке за детонационной волной, на твердотельную подложку и определены оптимальные характеристики потока частиц и пространственного положения подложки.
6. Бездиссипативный метод КАБАРЕ адаптирован для решения многомерных задач газовой динамики горения и детонации. На предложенном наборе тестовых задач из области газодинамики многокомпонентных реагирующих смесей показаны принципиальные преимущества данной методики в сравнении с методами, обладающими более высокой схемной вязкостью.
7. Разработан параллельный объектно-ориентированный программный комплекс для решения многомерных задач газодинамики реагирующих потоков на суперкомпьютерных вычислительных системах с возможностью использования различных физико-математических моделей и вычислительных алгоритмов, а также широкими возможностями обработки данных получаемых в ходе расчета результатов.

## Список литературы

1. *Seth D.* Hydrogen, History of // *Concise Encyclopedia of the History of Energy* / ed. by C. J. Cleveland. — Elsevier Science, 2009. — Pp. 241–252.
2. *Cavendish H.* Experiments on air // *Philos. Trans. R. Soc. London.* — 1784. — Vol. 74. — Pp. 119–153.
3. *Cavendish H.* Three papers, containing experiments on factitious air // *Philos. Trans. R. Soc. London.* — 1766. — Vol. 56. — Pp. 141–184.
4. *Davy H.* An account of an invention for giving light in explosive mixtures of fire-damp in coal mines by consuming the fire-damp // *Philos. Trans. R. Soc. London.* — 1816. — Vol. 106. — Pp. 23–24.
5. *Faraday H., Lyell C.* On explosions in coal mines // *Philos. Mag.* — 1845. — Vol. 26. — Pp. 16–35.
6. *Соловьев Ю. И.* История химии: Развитие химии с древнейших времен до конца XIX в. — 2-е изд, перераб. — М. : Просвещение, 1983. — 368 с.
7. *Krehl P. O. K.* History of Shock Waves, Explosions and Impact: A Chronological and Biographical Reference. — Berlin : Springer, 2009. — 1311 pp.
8. *Chapman D. L.* On the rate of explosion in gases // *Philos. Mag.* — 1899. — Vol. 47. — Pp. 90–104.
9. *Jouguet É.* Mécanique des explosifs. — Paris : O. Doin, 1917. — 516 pp.
10. *Dixon H.* Bakerian Lecture: The Rate of Explosion in Gases // *Philos. Trans. R. Soc., A.* — 1893. — Vol. 184. — Pp. 97–188.
11. *Зельдович Я. Б.* К теории распространения детонации в газообразных системах // *ЖЭТФ.* — 1940. — Т. 10, № 5. — С. 542–568.
12. *Neumann J. von* John von Neumann: Collected Works, 1903-1957 / ed. by A. H. Taub. — New York : Pergamon Press, 1963. — 548 pp.

13. *Döring W.* Über den Detonationsvorgang in Gasen // *Annalen der Physik.* — 1943. — Vol. 435, no. 6–7. — Pp. 421–436.
14. *Зельдович Я. Б., Козарко С. М.* О детонации газовых смесей // *Доклады АН СССР.* — 1948. — Т. 63, № 5. — С. 553–556.
15. *Kistiakowsky G. B., H. K. P.* The reaction zone in gaseous detonations // *J. Chem. Phys.* — 1956. — Vol. 25, no. 5. — Pp. 824–835.
16. *Щелкин К. И.* Теория горения и детонации // *Механика в СССР за 50 лет в четырех томах. Т. 2 / под ред. Л. И. Седов.* — М. : Наука, 1993. — С. 344–421.
17. *Daniell P. J.* The Theory of Flame Motion // *Proc. R. Soc. London, Ser. A.* — 1930. — Vol. 126, no. 802. — Pp. 393–405.
18. Математическая теория горения и взрыва / Я. Б. Зельдович, Г. И. Баренблатт, В. Б. Либрович, Г. М. Махвиладзе. — М. : Наука, 1980. — 478 с.
19. *Зельдович Я. Б., Франк-Каменецкий Д. А.* Теория теплового распространения пламени // *Журнал Химической Физики.* — 1938. — Т. 12, № 1. — С. 100–105.
20. *Salamandra G. D., Bazhenova T. Y., Naboko I. M.* Formation of detonation wave during combustion of gas in combustion tube // *Proc. Combust. Inst.* — 1959. — Vol. 7. — Pp. 851–855.
21. *Meyer J. W., Urtiew P. A., Oppenheim A. K.* On the inadequacy of gasdynamic processes for triggering the transition to detonation // *Combust. Flame.* — 1970. — Vol. 14, no. 13. — Pp. 13–20.
22. *Urtiew P. A., Oppenheim A. K.* Experimental Observations of the Transition to Detonation in an Explosive Gas // *Proc. R. Soc. London, Ser. A.* — 1966. — Vol. 295, no. 1440. — Pp. 13–28.

23. *Kurylo J., Dwyer H. A., Oppenheim A. K.* Numerical analysis of flowfields generated by accelerating flames // *AIAA Journal*. — 1980. — Vol. 8, no. 3. — Pp. 302–308.
24. *Lee J. H. S., Knystautas R., Freiman A.* High speed turbulent deflagrations and transition to detonation in H<sub>2</sub>-Air mixtures // *Combust. Flame*. — 1984. — Vol. 56, no. 2. — Pp. 227–239.
25. *Peraldi O., Knystautas R., Lee J. H.* Criteria for transition to detonation in tubes // *Symposium (International) on Combustion*. — 1988. — Vol. 21, no. 1. — Pp. 1629–1637.
26. *Settles G. S.* Schlieren and Shadowgraph Techniques: Visualizing Phenomena in Transparent Media. — Berlin : Springer-Verlag, 2001. — 376 pp.
27. *Spada M., Burgherr P.* An aftermath analysis of the 2014 coal mine accident in Soma, Turkey: Use of risk performance indicators based on historical experience // *Accid. Anal. Prev.* — 2016. — Vol. 87. — Pp. 134–140.
28. *Yanez J., Kuznetsov M., Souto-Iglesias A.* An analysis of the hydrogen explosion in the Fukushima-Daiichi accident // *Int. J. Hydrogen Energy*. — 2015. — Vol. 40, no. 25. — Pp. 8261–8280.
29. *Henrie J., Postma A.* Analysis of the Three Mile Island (TMI-2) hydrogen burn: tech. rep. / Rockwell Hanford Operations. — Richland, Wathington, 1982.
30. Pulse detonation propulsion: challenges, current status, and future perspective / G. Roy, S. Frolov, A. Borisov, D. Netzer // *Prog. Energy Combust. Sci.* — 2004. — Vol. 30, no. 6. — Pp. 545–672.
31. *Hjertager B. H.* Computer modelling of turbulent gas explosions in complex 2D and 3D geometries // *J. Hazard. Mater.* — 1993. — Vol. 34, no. 2. — Pp. 173–197.

32. *Gamezo V. N., T. O., Oran E. S.* Numerical simulations of flame propagation and DDT in obstructed channels filled with hydrogen–air mixture // *Proc. Combust. Inst.* — 2007. — Vol. 31, no. 2. — Pp. 2463–2471.
33. *Smirnov N. N., Panfilov I. I.* Deflagration to detonation transition in combustible gas mixtures // *Combust. Flame.* — 1995. — Vol. 101. — Pp. 91–100.
34. *Kagan L., Sivashinsky G.* The transition from deflagration to detonation in thin channels // *Combust. Flame.* — 2003. — Vol. 134. — Pp. 389–397.
35. Accelerating flames in cylindrical tubes with nonslip at the walls / V. Akkerman, V. Bychkov, A. Petchenko, L.-E. Eriksson // *Combust. Flame.* — 2006. — Vol. 145. — Pp. 206–219.
36. Механизм ускорения пламени и переход в детонация в водородно-кислородной смеси в канале / М. Ф. Иванов, А. Д. Киверин, М. А. Либман, В. Е. Фортов // *Доклады Академии Наук.* — 2010. — Т. 434, № 6. — С. 1–4.
37. *Иванов М. Ф., Киверин А. Д.* Влияние состава горючей смеси на развитие неустойчивости фронта пламени // *Химическая физика.* — 2010. — Т. 29, № 2. — С. 48–54.
38. *Ivanov M. F., Kiverin A. D., Galburt V. A.* A Computational Study of the External Shock-Wave Impact on the Combustion Regime // *Combust. Sci. Technol.* — 2010. — Т. 29, № 2. — С. 48–54.
39. *Warnatz J., Maas U., Dibble R.* Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation. — Springer Berlin Heidelberg, 2006.
40. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. — Издание 4-е, стереотипное. — М. : Наука, 1988. — 736 с. — Т. VI. Гидродинамика.
41. *Chase M. W. J.* NIST-JANAF Thermochemical Tables, 4th Edition. — New York : American Institute of Physics, 1998.

42. Chemkin collection / R. J. Kee [и др.]. — San Diego, CA : Reaction Design, Inc., 2000.
43. *Hirschfelder J., Curtiss C., Bird R. B.* Molecular theory of gases and liquids. — New York : Wiley, 1964. — 1280 pp.
44. *Neufeld P. D., Janzen A. R., Aziz R. A.* Empirical Equations to Calculate 16 of the Transport Collision Integrals  $\Omega^{(l,s)*}$  for the LennardJones (12–6) Potential // J. Chem. Phys. — 1972. — Vol. 57, no. 3. — Pp. 1100–1102.
45. Direct numerical simulation of micro combustion in a narrow circular channel with a detailed kinetic mechanism / E. Miyata [et al.] // Proc. Combust. Inst. — 2015. — Vol. 35, no. 3. — Pp. 3421–3427.
46. Numerical simulation of a laboratory-scale turbulent V-flame / J. B. Bell [et al.] // Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. — 2005. — Vol. 102, no. 29. — Pp. 10006–10011.
47. *Niemeyer K. E., Sung C.-J.* Accelerating moderately stiff chemical kinetics in reactive-flow simulations using GPUs // J. Comput. Phys. — 2014. — Vol. 256. — Pp. 854–871.
48. *Sewerin F., Rigopoulos S.* A methodology for the integration of stiff chemical kinetics on GPUs // Combust. Flame. — 2015. — Vol. 162, no. 4. — Pp. 1375–1394.
49. Адаптация системы кинетических уравнений для расчета газодинамики реагирующей водород-кислородной смеси / Ю. Гостинцев, Ю. Гамера, В. Петухов, В. Фортов // Химическая физика. — 1998. — Т. 17, № 5. — С. 67.
50. An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion / J. Li, Z. Zhao, A. Kazakov, F. L. Dryer // Int. J. Chem. Kinet. — 2004. — Vol. 36, no. 10. — Pp. 566–575.
51. A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation / M. Ó Conaire, H. J. Curran, J. M. Simmie, W. J. Pitz, C. K. Westbrook // Int. J. Chem. Kinet. — 2004. — Vol. 36, no. 11. — Pp. 603–622.

52. *Konnov A. A.* Remaining uncertainties in the kinetic mechanism of hydrogen combustion // *Combust. Flame.* — 2008. — Vol. 152, no. 4. — Pp. 507–528.
53. GRI Mech 3.0. — 1999. — URL: [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/).
54. *Schultz E., Shepherd J.* Validation of Detailed Reaction Mechanisms for Detonation Simulation: tech. rep. / California Institute of Technology. — Pasadena, CA, 2000.
55. *Mendoza Orbegoso E. M., Silva L.-s. F. F. d., Novgorodcev Junior A.* On the predictability of chemical kinetics for the description of the combustion of simple fuels // *J. Braz. Soc. Mech. Sci. Eng.* — 2011. — Vol. 33. — Pp. 492–505.
56. Evaluation of Prediction Ability of Detailed Reaction Mechanisms in the Combustion Performance in Hydrogen/Air Supersonic Flows / L. V. Bezgin, V. I. Kopchenov, A. S. Sharipov, N. S. Titova, A. M. Starik // *Combust. Sci. Technol.* — 2013. — Vol. 185, no. 1. — Pp. 62–94.
57. Uncertainty in stretch extrapolation of laminar flame speed from expanding spherical flames / F. Wu, W. Liang, Z. Chen, Y. Ju, C. K. Law // *Proc. Combust. Inst.* — 2015. — Vol. 35, no. 1. — Pp. 663–670.
58. *Калиткин Н. Н.* Численные методы. — М. : Наука, 1978. — 512 с.
59. *Kauffman C. W. and Sichel M., Wolanski P.* Dust Related Detonations // *Dynamic Structure of Detonation in Gaseous and Dispersed Media* / ed. by A. A. Borissov. — Dordrecht : Springer Netherlands, 1991. — Pp. 267–311.
60. *Veyssiere B.* "Double-front" detonations in gas-solid particles mixtures // *Dynamics of Shock Waves, Explosions and Detonations: AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics. Vol. 94* / ed. by J. R. Bowen, N. Manson, A. K. Oppenheim, R. I. Soloukhin. — New York : AIAA, 1984. — Pp. 265–276.
61. *Laffitte P., Bouchet R.* Suppression of explosion waves in gaseous mixtures by means of fine powders // *Symposium (International) on Combustion.* — 1958. — Vol. 7, no. 1. — Pp. 504–508.

62. Влияние твердых инертных частиц на детонацию горючей газовой смеси / А. А. Борисов, Б. Е. Гельфанд, С. А. Губин, С. М. Когарко // Физика горения и взрыва. — 1975. — Т. 6. — С. 909–914.
63. *Acrivos A., Taylor T. D.* Heat and Mass Transfer from Single Spheres in Stokes Flow // *Phys. Fluids*. — 1962. — Vol. 5, no. 4. — Pp. 387–394.
64. *Волков К. Н., Емельянов В. Н.* Течения газа с частицами. — М. : Физматлит, 2008. — 600 с.
65. *Белоцерковский О. М., Давыдов Ю. М.* Метод крупных частиц в газовой динамике. — М. : Наука, 1982. — 392 с.
66. Numerical modeling of the propagating flame and knock occurrence in spark-ignition engines / M. A. Liberman, M. F. Ivanov, O. E. Peil, D. M. Valiev, L.-E. Eriksson // *Comb. Sci. Tech.* — 2004. — Vol. 177, no. 1. — Pp. 151–182.
67. *Ivanov M. F., Liberman M. A., Kiverin A. D.* Flame acceleration and DDT of hydrogen-oxygen gaseous mixtures in channels with no-slip walls // *Int. J. Hydrogen Energy*. — 2011. — Vol. 36, no. 13. — Pp. 7714–7727.
68. *Хайпер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. — М. : Мир, 1999. — 685 с.
69. *Самарский А. А., Гулин А. В.* Численные методы. — М. : Наука, 1989. — 432 с.
70. Hot spot formation by the propagating flame and the influence of EGR on knock occurrence in SI engine / M. A. Liberman, M. F. Ivanov, D. M. Valiev, L.-E. Eriksson // *Comb. Sci. Tech.* — 2006. — Vol. 178, no. 9. — Pp. 1613–1647.
71. Mechanisms of ignition by transient energy deposition: Regimes of combustion wave propagation / A. D. Kiverin, D. R. Kassoy, M. F. Ivanov, M. A. Liberman // *Phys. Rev. E*. — 2013. — Vol. 87, no. 3. — P. 033015.

72. *Lieberman M. A., Kiverin A. D., Ivanov M. F.* Regimes of chemical reaction waves initiated by nonuniform initial conditions for detailed chemical reaction models // *Phys. Rev. E.* — 2012. — Vol. 85, no. 5. — P. 056312.
73. *Ivanov M. F., Kiverin A. D., Lieberman M. A.* Hydrogen-oxygen flame acceleration and transition to detonation in channels with no-slip walls for a detailed chemical reaction model // *Phys. Rev. E.* — 2011. — Vol. 83, no. 5. — P. 056313.
74. *Amdahl G. M.* Validity of the Single Processor Approach to Achieving Large Scale Computing Capabilities // *Proceedings of the April 18-20, 1967, Spring Joint Computer Conference.* — New York, NY, USA : ACM, 1967. — Pp. 483–485. — (AFIPS '67 (Spring)).
75. *Шпаковский Г. И., Серикова Н. В.* Программирование для многопроцессорных систем в стандарте MPI. — Мн. : БГУ, 2002. — 323 с.
76. Применение многопроцессорной вычислительной техники для решения задач внутренней баллистики / И. В. Семенов, П. С. Уткин, И. Ф. Ахмедьянов, М. И. С. // *Вычислительные методы и программирование.* — 2011. — Т. 12. — С. 183–193.
77. *Rouson D., Xia J., Xu X.* Scientific Software Design: The Object-Oriented Way. — Cambridge University Press, 2011. — 382 pp.
78. *Зельдович Я. Б.* К вопросу об энергетическом использовании детонационного горения // *Журнал технической физики.* — 1940. — Т. 10, № 17. — С. 1453–1461.
79. *Щелкин К. И.* К теории возникновения детонации в газовых смесях в трубах // *Доклады АН СССР.* — 1939. — Т. 23, № 7. — С. 636–640.
80. *Щелкин К. И.* Влияние шероховатости трубы на возникновение и распространение детонации в газах // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* — 1940. — Т. 10. — С. 823–832.

81. *Зельдович Я. Б.* К теории возникновения детонации в газах // Журнал технической физики. — 1947. — Т. 17, № 1. — С. 3–26.
82. DDT in a smooth tube filled with a hydrogen–oxygen mixture / M. Kuznetsov, V. Alekseev, I. Matsukov, S. Dorofeev // Shock Wave. — 2005. — Vol. 14, no. 3. — Pp. 205–215.
83. *Kuznetsov M., Liberman M., Matsukov I.* Experimental Study of the Preheat Zone Formation and Deflagration to Detonation Transition // Comb. Sci. Tech. — 2010. — Vol. 182, no. 11–12. — Pp. 1628–1644.
84. Flame acceleration and the transition to detonation of stoichiometric ethylene/oxygen in microscale tubes / M.-h. Wu, M. P. Burke, S. F. Son, R. A. Yetter // Proc. Combust. Inst. — 2007. — Vol. 31, no. 2. — Pp. 2429–2436.
85. *Clanet C., Searby G.* On the “tulip flame” phenomenon // Combust. Flame. — 1996. — Vol. 105, no. 1. — Pp. 225–238.
86. Formation of the preheated zone ahead of a propagating flame and the mechanism underlying the deflagration-to-detonation transition / M. A. Liberman, M. Kuznetsov, A. Ivanov, I. Matsukov // Physics Letters A. — 2009. — Vol. 373, no. 5. — Pp. 501–510.
87. *Gaathaug A. V., Vaagsaether K., Bjerketvedt D.* Experimental and numerical investigation of DDT in hydrogen–Air behind a single obstacle // Int. J. Hydrogen Energy. — 2012. — Vol. 37, no. 22. — Pp. 17606–17615.
88. *Kellenberger M., Ciccarelli G.* Propagation mechanisms of supersonic combustion waves // Proc. Combust. Inst. — 2015. — Vol. 35, no. 2. — Pp. 2109–2116.
89. *Zeldovich Y. B.* Regime classification of an exothermic reaction with nonuniform initial conditions // Combust. Flame. — 1980. — Vol. 39. — Pp. 211–214.

90. *Oran E. S., Gamezo V. N.* Origins of the deflagration-to-detonation transition in gas-phase combustion // *Combust. Flame.* — 2007. — Vol. 148. — Pp. 4–47.
91. *Lee J. H. S., Moen I. O.* The mechanism of transition from deflagration to detonation in vapor cloud explosions // *Prog. Energy Combust. Sci.* — 1980. — Vol. 6. — Pp. 359–389.
92. Detonation initiation on the microsecond time scale: DDTs / D. Kassoy, J. Kuehn, M. Nability, J. Clarke // *Comb. Theor. Modelling.* — 2008. — Vol. 12, no. 6. — Pp. 1009–1047.
93. Deflagration-to-detonation transition in highly reactive combustible mixtures / M. A. Liberman, M. F. Ivanov, A. D. Kiverin, M. S. Kuznetsov, A. A. Chukalovsky, T. V. Rakhimova // *Acta Astronautica.* — 2010. — Vol. 67. — Pp. 688–701.
94. *Liberman M. A., Kiverin A. D., Ivanov M. F.* On detonation initiation by a temperature gradient for a detailed chemical reaction models // *Phys. Lett. A.* — 2011. — Vol. 375. — Pp. 1803–1808.
95. *Kuznetsov M. S., Grune J., Matsukov I.* Effects of shock waves, boundary layer and turbulence on flame acceleration and DDT in highly reactive mixtures // *Proceedings of the July 24-29, 2011, 23<sup>rd</sup> ICDERS.* — 2011.
96. *Deshaies B., Joulin G.* Flame-speed sensitivity to temperature changes and the deflagration-to-detonation transition // *Combust. Flame.* — 1989. — Vol. 77. — Pp. 201–212.
97. *Warnatz J.* Concentration, pressure, and temperature-dependence of the flame velocity in hydrogen-oxygen-nitrogen mixtures // *Combust. Sci. Technol.* — 1981. — Vol. 26, no. 5. — Pp. 203–213.
98. *Манжале́й В. И.* Режимы детонации газа в капиллярах // *Физика горения и взрыва.* — 1992. — Т. 3. — С. 93–99.

99. Limits and mechanism of detonation re-initiation behind a multi-orifice plate / S. V. Khomik, B. Veyssiere, V. Medvedev S. P. and Montassier, H. Olivier // *Shock Waves*. — 2012. — Vol. 22, no. 3. — Pp. 199–205.
100. Detonation re-initiation mechanism following the Mach reflection of a quenched detonation / R. R. Bhattacharjee, S. S. M. Lau-Chapdelaine, G. Maines, L. Maley, M. I. Radulescu // *Proc. Combust. Inst.* — 2013. — Vol. 34, no. 2. — Pp. 1893–1901.
101. *Auban O., Zboray R., Paladino D.* Investigation of large-scale gas mixing and stratification phenomena related to LWR containment studies in the PANDA facility // *Nucl. Eng. Des.* — 2007. — Vol. 237, no. 4. — Pp. 409–419.
102. Hydrogen combustion in a flat semi-confined layer with respect to the Fukushima Daiichi accident / M. Kuznetsov, J. Yanez, J. Grune, A. Friedrich, Y. Jordan // *Nucl. Eng. Des.* — 2015. — Vol. 286. — Pp. 36–48.
103. *Boeck L. R., Hasslberger J., Sattelmayer T.* Flame Acceleration in Hydrogen/Air Mixtures with Concentration Gradients // *Combust. Sci. Technol.* — 2014. — Vol. 186, no. 10–11. — Pp. 1650–1661.
104. *Wang C. J., Wen J. X.* Numerical simulation of flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in hydrogen-air mixtures with concentration gradients // *Int. J. Hydrogen Energy*. — 2016.
105. Анализ и оценка методических подходов и технических решений по системам контроля водорода и обеспечения водородной безопасности для типовых блоков с РУ ВВЭР (АЭС-2006 и концепт-проект ВВЭР ТОИ): тех. отч. / Российский научный центр "Курчатовский институт". — М., 2011.
106. State-of-the-Art Report On Flame Acceleration And Deflagration-to-Detonation Transition In Nuclear Safety: tech. rep. / W. Breitung [et al.] ; OECD Nuclear Energy Agency. — Issy-les-Moulineaux, France, 2000.

107. Flammability of methane, propane, and hydrogen gases / K. L. Cashdollar, I. A. Zlochower, G. M. Green, R. A. Thomas, M. Hertzberg // *J. Loss Prev. Process Ind.* — 2000. — Vol. 13. — Pp. 327–340.
108. *Kumar R. K.* Flammability limits of hydrogen-oxygen-diluent mixtures // *J. Fire. Sci.* — 1985. — Vol. 3. — Pp. 245–262.
109. Flammability Limits for Hydrogen-Air Mixtures in the Presence of Ultra ne Droplets of Water (Fog) / S. P. Medvedev, B. E. Gel'fand, A. N. Polenov, S. V. Khomik // *Combustion, Explosion, and Shock Waves.* — 2002. — Vol. 38, no. 4. — Pp. 381–386.
110. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения: Справ. изд.: в 2 книгах; кн. 1 / А. Н. Баратов, А. Я. Корольченко, Г. Н. Кравчук [и др.]. — М. : Химия, 1990. — 496 с.
111. Report on the experimentally determined explosion limits, explosion pressures and rates of explosion pressure rise: tech. rep. / Federal Institute for Materials Research Testing (BAM). — 2002.
112. *Гельфанд Б. Е., Попов О. Е., Чайванов Б. Б.* Водород: параметры горения и взрыва. — М. : Физматлит, 2008. — 288 с.
113. *Левич В. Г.* Физико-химическая гидродинамика. — М. : Физматгиз, 1959. — 700 с.
114. *Накоряков В. Е., Покусаев Б. Г., Шрейбер И. Р.* Волновая динамика газо- и паро- жидкостных сред. — М. : Энергоатомиздат, 1990. — 248 с.
115. *Peters N.* Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion // *Symposium (International) on Combustion.* — 1988. — Vol. 21, no. 1. — Pp. 1231–1250.
116. *Moore S. R., Weinberg F. J.* High propagation rates of explosions in large volumes of gaseous mixtures // *Nature.* — 1988. — Vol. 290, no. 5801. — Pp. 39–40.

117. Laser ignition of combustible gases by radiative heating of small particles / P. C. Hills, D. K. Zhang, P. J. Samson, T. F. Wall // *Combust. Flame.* — 1992. — Vol. 91, no. 3. — Pp. 399–412.
118. Ignition by Mechanical Sparks: Ignition of Hydrogen/Air Mixtures by Submillimeter-Sized Hot Particles / D. Roth, P. Sharma, T. Haeber, R. Schiessl, H. Bockhorn, U. Maas // *Combust. Sci. Technol.* — 2014. — Vol. 186, no. 10–11. — Pp. 1606–1617.
119. *Beyrau F., Hadjipanayis M. A., Lindstedt R. P.* Ignition of fuel/air mixtures by radiatively heated particles // *Proc. Combust. Inst.* — 2013. — Vol. 34, no. 2. — Pp. 2065–2072.
120. *Beyrau F., Hadjipanayis M. A., Lindstedt R. P.* Time-resolved temperature measurements for inert and reactive particles in explosive atmospheres // *Proc. Combust. Inst.* — 2015. — Vol. 35, no. 2. — Pp. 2067–2074.
121. Nanotubes in a Flash–Ignition and Reconstruction / P. M. Ajayan, M. Terrones, A. de la Guardia, V. Huc, N. Grobert, B. Q. Wei, H. Lezec, G. Ramanath, T. W. Ebbesen // *Science.* — 2002. — Vol. 296, no. 5568. — Pp. 705–705.
122. *Berkowitz A. M., Oehlschlaeger M. A.* The photo-induced ignition of quiescent ethylene/air mixtures containing suspended carbon nanotubes // *Proc. Combust. Inst.* — 2011. — Vol. 33, no. 2. — Pp. 3359–3366.
123. Deflagration-to-detonation transition via the distributed photo ignition of carbon nanotubes suspended in fuel/oxidizer mixtures / D. J. Finigan, B. D. Dohm, J. A. Mockelman, M. A. Oehlschlaeger // *Combust. Flame.* — 2012. — Vol. 159, no. 3. — Pp. 1314–1320.
124. *Moore S. R., Weinberg F. J.* A Study of the Role of Radiative Ignition in the Propagation of Large Explosions // *Proc. R. Soc. London, Ser. A.* — 1983. — Vol. 385, no. 1789. — Pp. 373–387.

125. *Moore S. R., Weinberg F. J.* Further Studies of the Role of Radiative Ignition in the Propagation of Large Explosions // Proc. R. Soc. London, Ser. A. — 1987. — Vol. 409, no. 1836. — Pp. 1–20.
126. *Ivanov M. F., Kiverin A. D., Liberman M. A.* Ignition of deflagration and detonation ahead of the flame due to radiative preheating of suspended micro particles // Combust. Flame. — 2015. — Vol. 162, no. 10. — Pp. 3612–3621.
127. *Зельдович Я. Б., Компанеев А. С.* Теория детонации. — М. : Гос. изд-во технико-теоретической лит-ры, 1955. — 268 с.
128. Fabrication and microstructural characterization of nano-structured WC/Co coatings / N. S. Lim, S. Das, S. Y. Park, M. C. Kim, P. C. G. // Surf. Coat. Technol. — 2010. — Vol. 205, no. 2. — Pp. 430–435.
129. *Gill B. J.* Super D-Gun // Aircraft Engineering and Aerospace Technology. — 1990. — Vol. 62, no. 8. — Pp. 10–33.
130. Газотермическое напыление / Л. Х. Балдаев, В. Н. Борисов [и др.]. — М. : Маркет ДС, 2007. — 344 с. — Учеб. пособие под общ. ред. Л.Х. Балдаева.
131. *Гавриленко Т. П., Николаев Ю. А., Ульяницкий В. Ю.* Использование пережатой детонации для нанесения покрытий // Физика горения и взрыва. — 2010. — Т. 46, № 3. — С. 125–133.
132. *Shu C.-W.* High order WENO and DG methods for time-dependent convection-dominated PDEs: A brief survey of several recent developments // Journal of Computational Physics. — 2016. — Vol. 316. — Pp. 598–613.
133. *Lv Y., Ihme M.* Discontinuous Galerkin method for multicomponent chemically reacting flows and combustion // Journal of Computational Physics. — 2014. — Vol. 270. — Pp. 105–137.
134. *Houim R. W., Kuo K. K.* A low-dissipation and time-accurate method for compressible multi-component flow with variable specific heat ratios // Journal of Computational Physics. — 2011. — Vol. 230, no. 23. — Pp. 8527–8553.

135. *Yu R., Bai X.-S., Bychkov V.* Fractal flame structure due to the hydrodynamic Darrieus-Landau instability // *Phys. Rev. E.* — 2015. — Vol. 92, issue 6. — P. 063028.
136. Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов / В. Головизнин, М. Зайцев, С. Карабасов, И. Короткин. — М. : Издательство МГУ, 2013. — 480 с.
137. *Iserles A.* Generalized Leapfrog Methods // *IMA Journal of Numerical Analysis.* — 1986. — Vol. 6, no. 4. — Pp. 381–392.
138. *Головизнин В. М., Самарский А. А.* Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной // *Матем. моделирование.* — 1998. — Т. 10, № 1. — С. 86–100.
139. *Головизнин В. М., Самарский А. А.* Некоторые свойства разностной схемы “кабаре” // *Матем. моделирование.* — 1998. — Т. 10, № 1. — С. 101–116.
140. *Головизнин В. М., Карабасов С. А., Кобринский И. М.* Балансно-характеристические схемы с разделенными консервативными и потоковыми переменными // *Матем. моделирование.* — 2003. — Т. 15, № 9. — С. 29–48.
141. *Головизнин В. М.* Балансно-характеристический метод численного решения уравнений газовой динамики // *Доклады академии наук.* — 2005. — Т. 403, № 4. — С. 459–464.
142. *Woodward P., Colella P.* The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks // *Journal of Computational Physics.* — 1984. — Vol. 54, no. 1. — Pp. 115–173.
143. *Shu C.-W., Osher S.* Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes // *Journal of Computational Physics.* — 1988. — Vol. 77, no. 2. — Pp. 439–471.

144. *Karabasov S. A., Goloviznin V. M.* New Efficient High-Resolution Method for Nonlinear Problems in Aeroacoustics // *AIAA Journal*. — 2007. — Vol. 45, no. 12. — Pp. 2861–2871.
145. CABARET method on unstructured hexahedral grids for jet noise computation / G. A. Faranosov, V. M. Goloviznin, S. A. Karabasov, V. G. Kondakov, V. F. Kopyev, M. A. Zaitsev // *Comput. Fluids*. — 2013. — Vol. 88. — Pp. 165–179.
146. *Karabasov S. A., Goloviznin V. M.* Compact Accurately Boundary-Adjusting high-REsolution Technique for fluid dynamics // *Journal of Computational Physics*. — 2009. — Vol. 228, no. 19. — Pp. 7426–7451.
147. *Данилин А., Соловьев А. В., Зайцев А. М.* Модификация схемы "КАБАРЕ" для численного моделирования течений многокомпонентных газовых смесей в двухмерных областях // *Вычислительные методы и программирование*. — 2015. — Т. 16. — С. 436–445.
148. *Самарский А., Попов Ю.* Разностные методы решения задач газовой динамики. — М. : Наука, 1992. — 423 с.
149. *Lee J. H. S.* Initiation of gaseous detonation // *Ann. Rev. Phys. Chem.* — 1977. — Vol. 28. — Pp. 75–104.
150. Combustion wave propagation and detonation initiation in the vicinity of closed-tube end walls / J. Yageta, S. Shimada, K. Matsuoka, J. Kasahara, A. Matsuo // *Proceedings of the Combustion Institute*. — 2011. — Vol. 33, no. 2. — Pp. 2303–2310.
151. *Proust C.* Gas flame acceleration in long ducts // *J. Loss Prev. Process Ind.* — 2015. — Vol. 36. — Pp. 387–393.