

ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ  
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ

УДК 536.464

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЖИМОВ ГОРЕНИЯ И ДЕТОНАЦИИ  
ВОДОРОДО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ В РАМКАХ  
МЕХАНИКИ ДВУХФАЗНЫХ РЕАГИРУЮЩИХ СРЕД

© 2011 г. Б. С. Ермолаев<sup>1</sup>, Б. А. Хасайнов<sup>2</sup>, К. А. Слепцов<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт химической физики им. Н. Н. Семенова РАН, Москва

<sup>2</sup>Институт ППРИМ УПР 3394 СНРС, Пуатье, Франция

<sup>3</sup>ВНИИАЭС, Москва

\*E-mail: boris.ermolaev@yahoo.com

\*\*E-mail: boris.khasainov@lcd.ensma.fr

\*\*\*E-mail: const@dezcom.org

Поступила в редакцию 01.04.2011

Проведено численное моделирование волн горения и детонации, распространяющихся по неподвижной газовой смеси в пористой инертной засыпке. Расчеты выполнены в одномерном приближении с помощью компьютерной программы EFAE, разработанной в рамках механики многофазных реагирующих сред. Химическое превращение газа моделируется одностадийной реакцией Аррениусова типа с константами, которые подбирались исходя из имеющихся экспериментальных данных по задержкам воспламенения за отраженными ударными волнами. Расчеты проведены для водородо-воздушных смесей с 35 и 15% водорода и сопоставлены с литературными экспериментальными данными, в которых варьировалось начальное давление и диаметр частиц засыпки. С помощью численного моделирования удалось получить все 3 режима горения (медленное, быстрое и сверхзвуковое), которые наблюдаются в эксперименте, а также прекращение горения при условиях ниже пороговых. Кроме того, расчеты качественно воспроизводят экспериментальные данные по изменению режима горения при переходе от стехиометрии к бедной смеси, а также по зависимости скорости волны горения, предельных условий смены режима горения и погасания от начального давления и размера частиц засыпки. Показано, что сверхзвуковые волны, распространяющиеся со скоростью ниже 1100 м/с, не имеют поверхности Чепмена–Жуге в конце зоны реакции и, очевидно, их нельзя относить к детонации, как это делается в цитируемой литературе.

*Ключевые слова:* пористая среда, горение, детонация, водородо-воздушные смеси.

## ВВЕДЕНИЕ

Распространение волн химического превращения по неподвижной газовой смеси, заполняющей свободный объем пористого слоя из зерен инертного материала, — сложный процесс, охватывающий широкий диапазон скоростей от нормального горения до почти идеальной детонации. Исследования представляют очевидный интерес для обеспечения взрывобезопасности при эксплуатации газовых систем и накопления знаний о свойствах волн горения и детонации в специфических условиях газодинамики течения в пористой среде. В литературе (см., например, [1–6]) приводится обширная экспериментальная информация относительно режимов, их границ и скоростей горения для широкого диапазона газоздушных и кислородных смесей. Изучено влияние начального давления, активности и соотношения компонентов смеси, а также материала и размера частиц пористой засыпки; приводятся

теоретические оценки. Численное моделирование использовалось для анализа медленного режима горения газов вблизи предела погасания применительно к пористым горелкам [7], когда перенос тепла теплопроводностью по твердой массе играет важную роль. Для быстрых режимов горения и детонации численное моделирование не применялось. Причина состоит в том, что точное описание течения реагирующего газа в поровых промежутках инертной засыпки представляет сложную проблему, а подход, основанный на применении уравнений механики двухфазных реагирующих сред с осреднением характеристик течения по объему, большому по сравнению с размером элементов засыпки, вносит неточности в расчет скорости химического превращения, которая является функцией локальных значений температуры и концентрации компонентов, а не их осредненных значений.

Однако, по нашему мнению, достоинства механики двухфазных реагирующих сред (точное

описание особенностей течений в пористых средах на макро-уровне и сравнительная легкость получения решений) перевешивают указанные неточности. План исследований, выбранный нами, состоял в том, чтобы с помощью численных расчетов воспроизвести режимы, границы и скорости, наблюдаемые в эксперименте, подобрав, при необходимости, константы скорости брутто-реакции химического превращения, которые обеспечили бы приемлемое согласие расчетов с массивом опытных данных. И затем провести анализ структуры течения, прежде всего в волнах быстрого и сверхзвукового горения, имеющих скорости в диапазоне 200–800 м/с, которые представляют наибольший интерес. При подборе кинетических констант следует идти от известных значений, используемых при описании волн химического превращения в чистом газе. Затем, если расчеты не дадут согласия с экспериментом, следует уменьшить энергию активации, имея в виду, что по мере снижения осредненной температуры реагирующего газа в поровом пространстве остаются очаги с высокой температурой, достаточной для протекания реакции с заметной скоростью.

В следующих разделах статьи будет дан краткий обзор экспериментальных данных по горению газов в пористой среде, затем мы представим теоретическую модель и компьютерную программу, дадим входные константы модели и приведем результаты расчетов для водородо-воздушных смесей, выбранных объектом исследования, дополнив их сравнением с экспериментальными данными и обсуждением.

### КРАТКИЙ ОБЗОР ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

По сравнению с трубами, имеющими шероховатые стенки или искусственные препятствия, пористые среды характеризуются гораздо более высокими коэффициентами сопротивления трения и теплопередачи. Распространение волны горения по газу, заполняющему пористую среду, сопровождается более высокими потерями количества движения и тепла, чем при аналогичных условиях в трубах. Газовый поток оказывается сильнее турбулизован и отличается более высокой локальной неоднородностью температуры и концентраций. Следствием этого является более широкий спектр режимов горения, по сравнению с тем, что наблюдается для газов в трубах, а также сильное различие по характеристикам и пространственной структуре волны горения.

Типичный объект исследований [1–6]: вертикально расположенная стальная труба внутренним диаметром от 20 до 35 мм с рабочим участком длиной 700 мм в виде пористого слоя из стальных или керамических шариков или пенополиурета-

на. Горение исследуемой смеси, заполняющей свободный объем трубы, инициировали взрывом проволочки, помещенной в свободном участке трубы длиной 20–100 мм над пористым слоем. В опытах регистрировали свечение волны горения с помощью оптико-волоконных датчиков, размещенных в отверстиях через каждые 100 мм вдоль трубы, а также давление с помощью пьезоэлектрического датчика, установленного ближе к нижнему торцу трубы.

Смеси газов готовили в отдельных баллонах, оборудованных внутри нагревателями для ускорения перемешивания газов за счет конвекции. Перед опытом пористый слой вакуумировали и заполняли газовой смесью. Пористость (отношение объема пор к объему пористого слоя) определяли по количеству жидкости, необходимой для заполнения слоя.

Исследовались взрывчатые газы, охватывающие широкий диапазон активности, включая кислородные и воздушные смеси водорода, ацетилена, метана и пропана, от стехиометрии до предельно бедных смесей. Размер частиц засыпки изменяли от (в среднем) 80 мкм до 12 мм. Начальное давление варьировали от долей атмосферы до 100 атм. Было показано, что если начальное давление смеси ниже некоторой пороговой величины  $P_{cr}$ , то горение вглубь засыпки не проникает. При более высоких давлениях горение входит в засыпку, при этом были выделены следующие режимы распространения фронта реакции [3]:

режим медленного горения со скоростями в диапазоне от скорости нормального горения до нескольких десятков метров в секунду;

дозвуковой режим быстрого горения с типичными скоростями от нескольких десятков м/с до 200–300 м/с;

сверхзвуковой режим горения со скоростями от 400–800 м/с до величин, близких нормальной скорости детонации.

Медленное горение идет без заметного перепада давления во фронте волны. При быстром горении перепад давления составляет 10–20% от величины начального давления, пик давления с плавно нарастающим передним фронтом располагается в зоне реакции. При сверхзвуковом горении профиль давления имеет форму, характерную для детонационных волн в газе.

Измеренные значения скорости фронта отвечают установившемуся волновому процессу, выход на установившееся значение достигается на длине 200–300 мм для режима горения и 100 мм для сверхзвукового режима при отклонениях, типично не превышающих 10%. Тенденций к осущетвлению замедлению или ускорению пламени после выхода на установившийся режим не отмечено.

В очень бедных ацетилено-воздушных и кислород-водородных смесях наблюдается лишь режим медленного горения со скоростью, близкой нормальной скорости горения смеси. В высокоактивных кислородных смесях наблюдается лишь сверхзвуковой режим горения, а дозвуковые режимы отсутствуют.

Для смесей с промежуточной активностью в зависимости от начального давления, как правило, осуществляются два режима: медленное горение или сверхзвуковое горение. Переход от одного режима горения к другому при изменении начального давления смеси происходит скачком, процессы с промежуточными скоростями (между 20 и 500 м/с) не наблюдаются. Существует узкая область начальных давлений, в которой в зависимости от условий инициирования возможен тот или другой режим. В некоторых опытах наблюдался скачкообразный переход с одного режима на другой непосредственно при распространении пламени [8].

Режим быстрого горения был обнаружен на смесях кислород-водород при содержании водорода от 15 до 20 об. %. В этих смесях при изменении начального давления можно получить все три режима распространения пламени. При увеличении начального давления скорость горения возрастает, охватывая весь интервал от нормальной скорости горения до скорости детонации Чепмена-Жуге.

Размер частиц засыпки оказывает существенное влияние на характеристики процесса: при увеличении размера частиц скорость горения возрастает, пороговые величины начального давления, определяющие возможность горения и разграничивающие режимы горения, заметно снижаются. Напротив, материал частиц засыпки практически не влияет на процесс. Это объясняется тем обстоятельством, что теплообмен между фазами не зависит от теплопроводности засыпки.

Теоретический анализ [2, 5] связывает наблюдаемые закономерности с характерными свойствами течений в пористых средах, и, прежде всего, с сильной теплопередачей от газа к поверхности аэрофазы, а также с большими пульсационными составляющими и высокими потерями импульса при течении газа в порах. В области параметров, где наблюдаются сверх-звуковые режимы горения, диаметр пор в несколько десятков раз больше размера детонационной ячейки. Критическое давление, необходимое, чтобы пламя проникло в пористую засыпку, можно оценить по критическому числу Пекле, в которое входят нормальная скорость горения, коэффициент температуропроводности газа и диаметр пор засыпки.

### ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Численное моделирование проводили с помощью одномерной версии компьютерной программы EFAE [9], разработанной ранее для анализа инициирования и распространения детонации в газовых, конденсированных и двухфазных средах. Течение газа в пористой среде моделируется уравнениями механики двухфазных реагирующих сред [10].

Расчетная область представляет замкнутую цилиндрическую трубу, большая часть которой, за исключением короткого участка вблизи левого торца, где размещен инициатор, равномерно заполнена инертными сферическими частицами; промежутки между частицами и левый пустой участок заполнены взрывчатой газовой смесью. Размер частиц и пористость слоя определяют структуру пористой среды. В модели предполагается, что обе фазы, из которых состоит среда, непрерывно распределены в каждой точке пространства. Фазы подчиняются разным уравнениям состояния и имеют различные температуру, плотность, давление и скорость течения, которые определяются осреднением по элементарному объему, содержащему достаточное количество элементов среды, но имеющему малые размеры по сравнению с характерными размерами анализируемого течения. Межфазное трение и теплообмен при течении газа в пористом слое описывается с помощью общепринятых эмпирических зависимостей. Входные параметры, определяющие теплофизические свойства газа, подбираются с учетом литературных данных и термодинамических расчетов детонации Чепмена-Жуге. Химическое превращение моделируется глобальной одностадийной реакцией Аррениусова типа:

$$\frac{dY}{dt} = ZY^n P^n \exp(-E_a/RT).$$

Здесь  $Y$  – массовая доля продуктов химического превращения (в исходном состоянии  $Y = 0$ , при полном превращении  $Y = 1$ ),  $P$  – давление в Па и  $T$  – температура. Константы: энергия активации  $E_a$ , эффективный порядок реакции  $n$  и предэкспоненциальный фактор  $Z$  подбираются в первом приближении, исходя из имеющихся экспериментальных данных по задержкам воспламенения за отраженными ударными волнами.

Для расчета конвективной передачи тепла от нагретого газа к частицам засыпки в каждой точке среды вместе с уравнениями движения решается уравнение теплопроводности в частице засыпки. Частицы считаются несжимаемыми и недеформируемыми. Среди упрощений модели отметим, что пренебрегается влиянием горения (степени превращения) газа на его теплофизические свойства и на коэффициенты сопротивления и передачи тепла при фильтрации газа в порах. Кроме

Таблица 1. Расчетные термодинамические характеристики детонации водородо-воздушных смесей при начальном давлении 0.1 МПа и начальной температуре 293К

Смесь, моль. %	35% H <sub>2</sub> + 65% воздух	15% H <sub>2</sub> + 85% воздух
$\rho_0$ , кг/м <sup>3</sup>	0.799	1.019
$\gamma_0$	1.38	1.39
$M_0$ , г/моль	19.5	24.83
$D_{CJ}$ , м/с	2048	1516
$T$ , К	2968	2001
$P$ , МПа	1.59	1.083
$\gamma$	1.18	1.26
$M$ , г/моль	22.3	26.9
$Q$ , МДж/кг	3.05	1.43

того, мы пренебрегаем переносом тепла теплопроводностью вдоль слоя частиц засыпки, в отличие от моделей, рассматривающих горение газов вблизи предела погасания [7], где этот перенос играет важную роль. Уравнения движения решаются с использованием явной разностной схемы и метода антидиффузии с коррекцией потока. Полностью уравнения модели приведены в [9].

Данная модель, как и аналогичные модели, разработанные в рамках указанного подхода, успешно применяются при анализе разнообразных волновых процессов в газодисперсных и конденсированных энергетических материалах. Они позволяют адекватно рассчитывать особенности течений с химическими превращениями при интенсивных межфазных взаимодействиях газа с конденсированными частицами. И хотя исходные уравнения включают характеристики течения, получаемые формальным осреднением по большому числу элементов среды (для нашей задачи – частиц засыпки), модели дают хорошие результаты даже при рассмотрении волновых процессов с крутыми передними фронтами, сравнимыми по толщине с размером элементов среды, включая волны быстрой дефлаграции и многофронтной детонации.

Процесс горения инициируется точечным взрывом заданной энергии в свободном объеме у закрытого торца трубы. Частицы засыпки в виде шариков одинакового размера изготовлены из стали. В качестве объекта исследования мы выбрали смеси водорода с воздухом. В расчетах варьировали содержание водорода в смеси, начальное давление, кинетические параметры горения и размер частиц засыпки.

Термодинамические характеристики исходной смеси и продуктов превращения, необходимые для численного моделирования, определялись с помощью программы TDS для уравнения состояния идеального газа [11]. Расчеты проводились для детонации Чепмена–Жуге при начальных

значениях давления и температуры 0.1 МПа и 293К, соответственно. Результаты расчетов для двух смесей с 35 и 15% водорода приведены в Табл. 1. Здесь параметры с индексом “0” относятся к исходной смеси, а без индекса – к продуктам детонации. При выборе кинетических констант для скорости химического превращения мы опирались на обобщенные экспериментальные данные по задержкам воспламенения водородных смесей в ударных трубах [12–13] и их зависимости от соотношения компонентов, давления и температуры. Соответствующий набор, обозначенный как K1:  $E_a = 14.6$  ккал/моль,  $n = 0.95$  и  $Z = 22.5$  для смеси 35% H<sub>2</sub> + 65% воздух и  $Z = 5$  для смеси с 15% H<sub>2</sub>. Кроме того, по причинам, о которых будет сказано ниже, несколько расчетов для смеси 35% H<sub>2</sub> + 65% воздух были проведены с другим набором кинетических констант (набор K2), в котором энергия активации была снижена до 5 ккал/моль,  $n = 0.95$  и  $Z = 0.12$ .

## РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Расчеты проводились применительно к экспериментальным данным для воздушных смесей с 35 и 15% водорода с засыпками из стальных шариков диаметром 2.5, 5 и 11.5 мм, которые приведены в [6]. Нормальная скорость горения смесей равна 2.63 и 0.38 м/с соответственно. Сводные результаты опытов приведены в табл. 2. На смеси с 35% водорода наблюдается только сверхзвуковой режим горения. При начальном давлении ниже  $P_{cr}$  происходит погасание. При увеличении размера частиц засыпки предельное давление  $P_{cr}$  уменьшается. На смеси с 15% водорода наблюдается лишь дозвуковые режимы быстрого (60–280 м/с) и медленного (1–10 м/с) горения. При уменьшении размера частиц засыпки предельное давление и давление на границе, разделяющей

Таблица 2. Сводные экспериментальные данные для воздушных смесей с содержанием водорода 35 и 15% [6]

Диаметр частиц засыпки, мм	Характеристики волны горения при начальном давлении, $P_0$		Условия на пределе горения		Условия на границе между режимами	
	Скорость волны горения, м/с	Макси-мальное давление, МПа	Предельное давление $P_{cr}$ , МПа	Скорость волны на пределе, м/с	Давление на границе, МПа	Скорость волны на границе, м/с
35% водород + 65% воздух при $P_0 = 0.1$ МПа						
2.5	580	0.9	0.09	540	—	—
5.0	650	1.1	0.05	580	—	—
11.5	830	1.2	0.035	720	—	—
15% водород + 85% воздух при $P_0 = 0.2$ МПа						
2.5	2	0.05	0.18	1.2	более 0.4	—
5.0	10–60	0.4	0.13	2	0.18–0.22	10/50*
11.5	280	—	0.04	1.3	0.06–0.08	3/50*

\* Цифры относятся к граничным скоростям медленного и быстрого режимов горения соответственно.

Таблица 3. Сводные результаты расчетов с использованием набора кинетических констант  $K1$

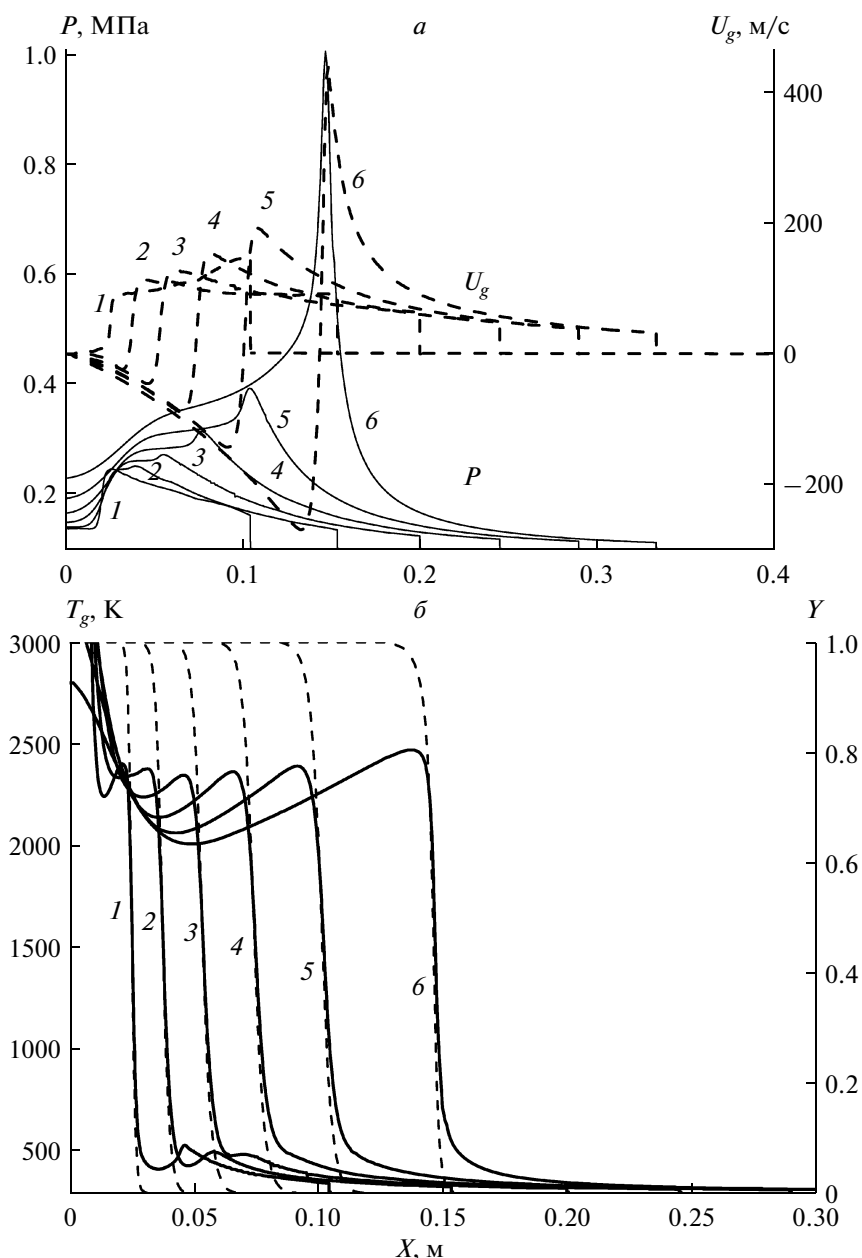
Начальное давление, МПа	Диаметр частиц засыпки, мм	Скорость волны горения, м/с	Максимальное давление, МПа
35% водород + 65% воздух			
0.1	11.5	1870	3.4
0.1	5.0	1640	2.2
0.1	3.5	1400	1.4
0.1	2.5	560*)	0.5–3.0*
0.1	1.2	430*)	0.4–3.0*
0.1	0.9	420*)	0.35–2.3*
0.1	0.6	Погасание	
0.4	2.5	1950	11.0
0.2	2.5	1810	5.0
0.15	2.5	1505	3.0
0.06	2.5	480*	0.27–2.5*
0.04	2.5	440*	0.17–1.2*
0.03	2.5	Погасание	
15% водород + 85% воздух			
0.2	11.5	380	0.6
0.1	11.5	300	0.4
0.3	5.0	180	0.4
0.15	5.0	10	0.2

\* Пульсирующий режим горения

быстрое и медленное горение, сдвигаются в область более высоких значений.

Результаты расчетов с набором кинетических констант  $K1$  приведены в табл. 3. Видно, что численные расчеты, в качественном согласии с экс-

периментальными данными, воспроизводят все три режима горения и погасание. Как и в эксперименте, на смеси с 35% водорода имеет место лишь сверхзвуковой режим горения, а на бедной смеси два режима горения с дозвуковыми скоро-

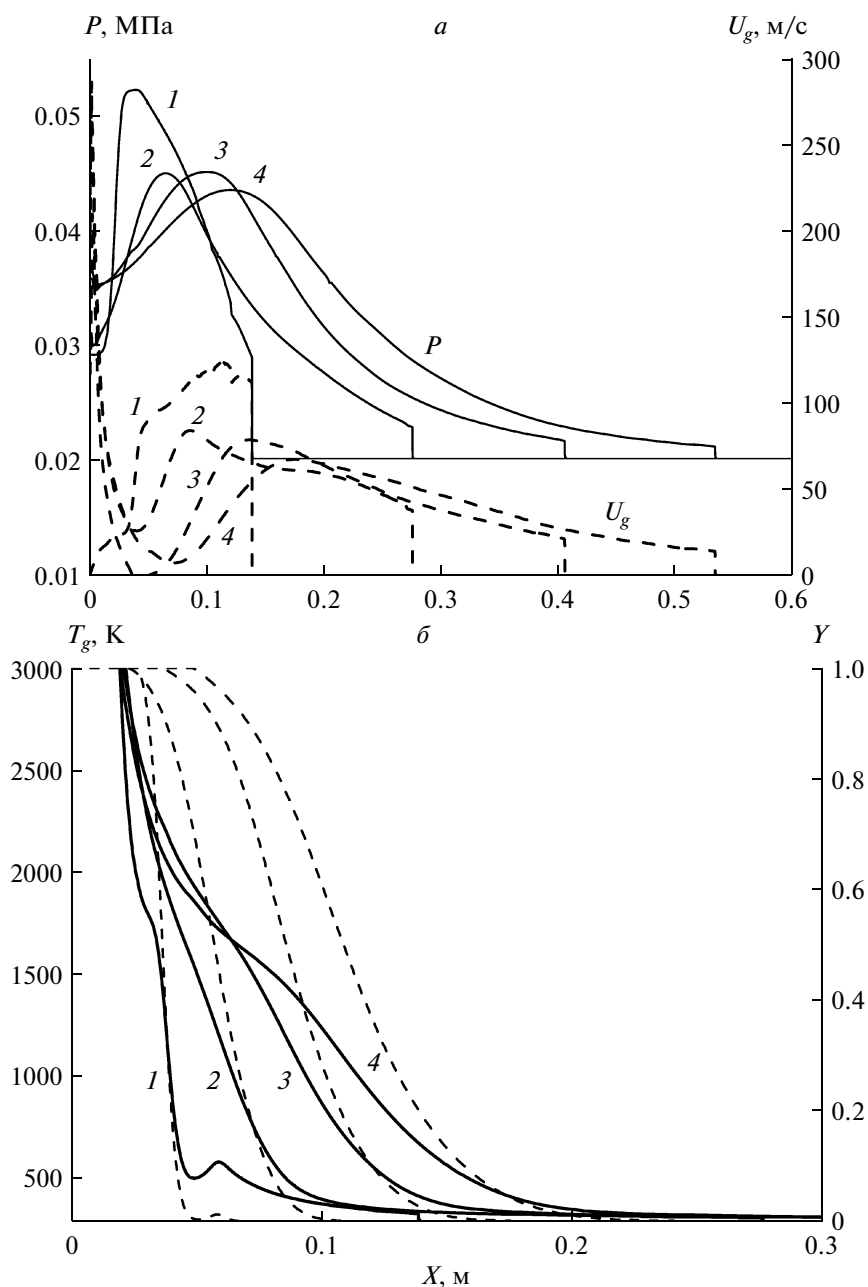


**Рис. 1.** Начальная фаза эволюции волны горения после входа в засыпку. Пространственные профили (а) давления  $P$  (сплошные линии) и скорости газа  $U_g$  (пунктирные линии); (б) температуры газа  $T_g$  (сплошные линии) и доли сгоревшего газа  $Y$  (пунктирные линии), кривые 1–6 с шагом по времени 0.1 мс. Край засыпки 0.02 м. Смесь с 35% водорода, вариант с кинетикой  $K1$ , начальным давлением 0.1 МПа и диаметром частиц 2.5 мм

стями. Как и в эксперименте, скорость волны горения снижается при уменьшении размера частиц засыпки, вплоть до перехода на другой (менее скоростной) режим или прекращение горения, и растет при увеличении начального давления.

Эволюция волны горения, вошедшей в пористый слой, во времени зависит от свойств газа, размера частиц и энергии инициирования. Типичная картина, разворачивающаяся на начальной фазе, для смеси с 35% водорода показана на

рис. 1 и выглядит следующим образом. Видно, что волна давления, вошедшая в пористый слой, расщепляется: вперед со скоростью, близкой к скорости звука в газе (417 м/с), убегает предвестник с монотонно уменьшающейся амплитудой давления. Тепловая волна вместе с зоной химического превращения и максимумом давления поначалу отстает под действием потерь тепла в засыпку. Однако по мере роста давления скорость волны быстро растет, достигая, а затем и превышая скорость предвестника. Если же размер ча-

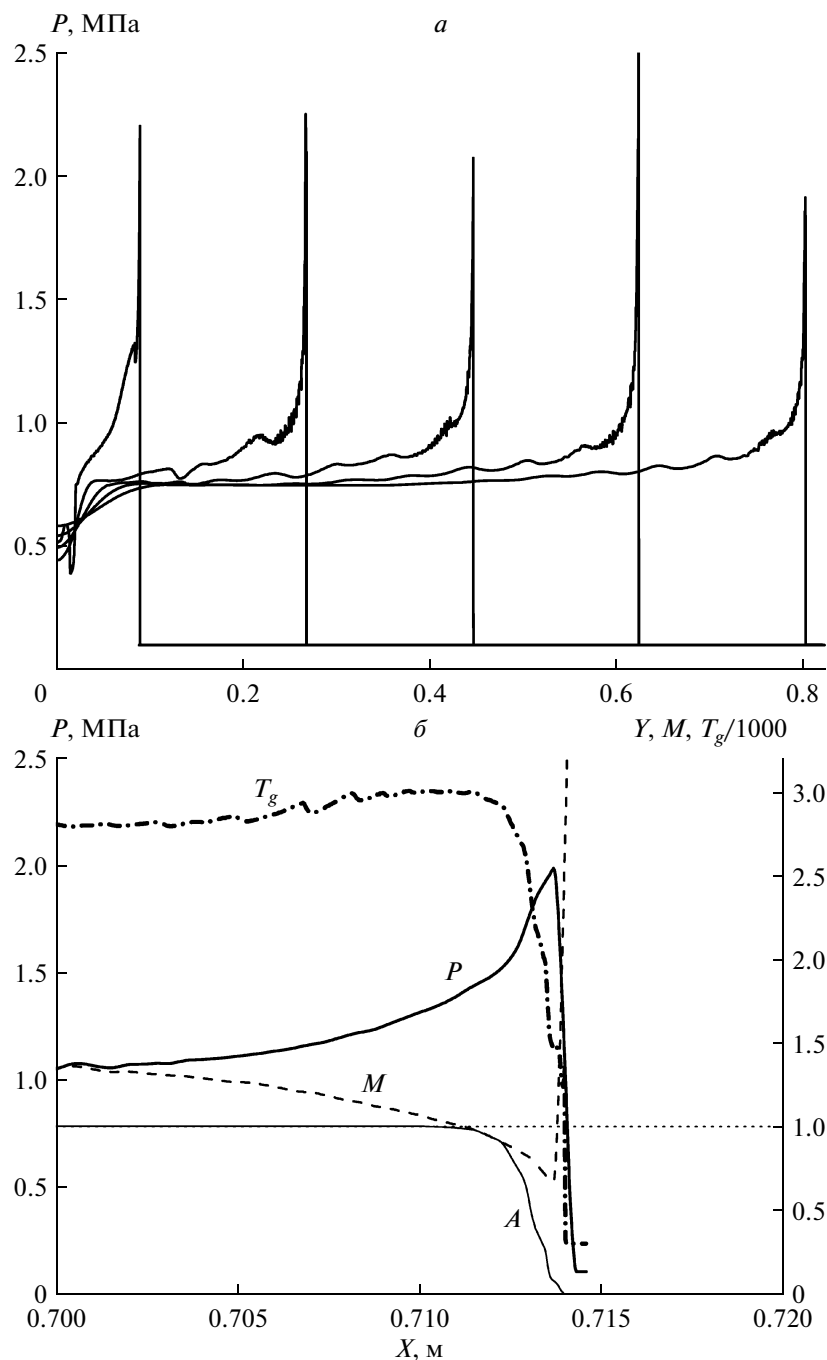


**Рис. 2.** Начальная фаза эволюции волны горения после входа в засыпку, демонстрирующая затухание волны. Пространственные профили (а) давления  $P$  (сплошные линии) и скорости газа  $U_g$  (пунктирные линии); (б) температуры газа  $T_g$  (сплошные линии) и доли сгоревшего газа  $Y$  (пунктирные линии), кривые 1–4 с шагом по времени 0.3 мс. Край засыпки 0.02 м. Смесь с 35% водорода, вариант с кинетикой  $K1$ , начальным давлением 0.02 МПа и диаметром частиц 2.5 мм

стиц меньше некоторой предельной величины (в данном случае 0.9 мм) или начальное давление ниже предельного давления (0.04 МПа), то зона химического превращения деградирует, пик давления разглаживается и горение прекращается. Такая картина показана на рис. 2.

В случае частиц засыпки большого размера (3.5–11.5 мм) или при повышенном начальном

давлении (0.15–0.4 МПа) волна, вошедшая в пористый слой, после быстрого ускорения выходит на детонационный уровень, распространяясь с установившейся скоростью в диапазоне 1400–1950 м/с. Соответствующий пример дан на рис. 3. Здесь показана детонационная волна, которая на большей части длины заряда распространяется с установившейся скоростью 1640 м/с и имеет



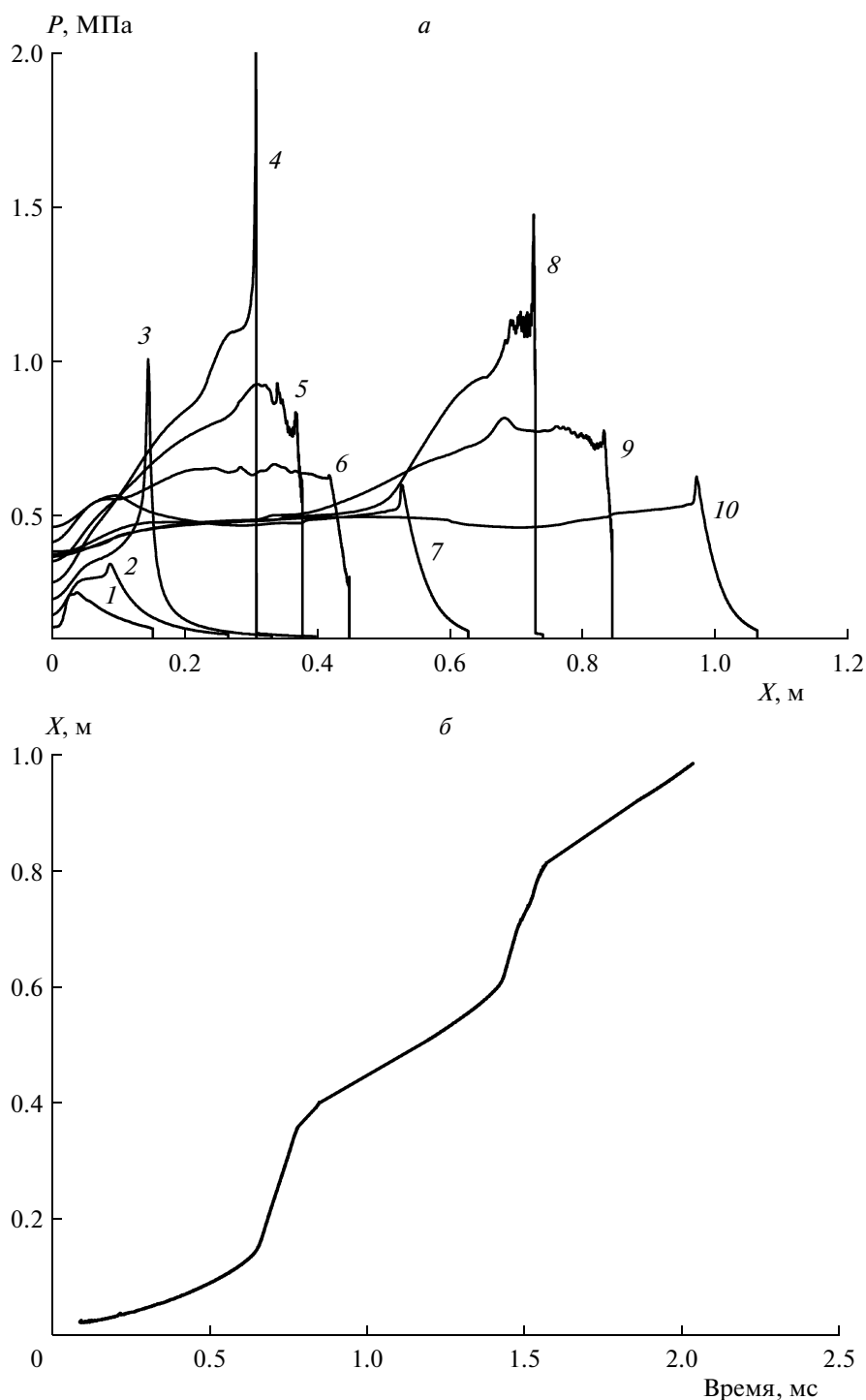
**Рис. 3.** Детонационный режим горения, смесь с 35% водорода, скорость волны 1640 м/с. Расчет с набором  $K1$ , размер частиц 5 мм, начальное давление 0.1 МПа. Пространственные профили давления в различные моменты времени с шагом 0.1 мс (а). Структура волны в виде профилей давления ( $P$ ), температуры газа ( $T_g$ ), числа Маха ( $M$ ) и доли сгоревшего газа ( $Y$ ) в момент времени 0.45 мс (б)

скачкообразный фронт с примыкающей к нему зоной реакции толщиной около 3 мм. В конце зоны реакции, когда  $Y = 1$ , число Маха, построенное по скорости газа в системе координат, движущейся с фронтом волны, и скорости звука в газе, переходит через критическое значение, равное 1.

Если уменьшить размер частиц засыпки или начальное давление в диапазоне, ограниченном

снизу предельными значениями, скорость волны снижается. При этом вместо стационарной волны имеет место галолирующий режим, когда фаза ускорения волны, завершающаяся формированием детонационно-подобного пика давления, периодически сменяется фазой депрессии с профилем давления без пика и гораздо меньшей скоростью распространения и наоборот. На фазе





**Рис. 4.** Галопирующий режим сверхзвукового горения, средняя скорость волны 560 м/с. Смесь с 35 % водорода, расчет с набором  $K1$ , размер частиц 2.5 мм, начальное давление 0.1 МПа. Пространственные профили давления в различные моменты времени (*a* – моменты времени, мс: (1) 0.25, (2) 0.5, (3) 0.65, (4) 0.75, (5) 0.8, (6) 0.9, (7) 1.0, (8) 1.5, (9) 1.6, (10) 2.0, а также траектория фронта горения (*б*).

ускорения пик давления догоняет и поглощает предвестник, на фазе депрессии, предвестник вновь убегает вперед. Пример волны, распространяющейся в галопирующем режиме, показан на рис. 4.

Отметим еще раз, что хотя в качественном отношении расчеты правильно воспроизводят основные закономерности, наблюдаемые в эксперименте, но есть и различия. Во-первых, расчетные пороговые значения начального давления и

Таблица 4. Результаты расчетов для смеси 35% водорода + 65% воздуха с использованием набора кинетических констант  $K_2$

Начальное давление, МПа	Диаметр частиц засыпки, мм	Скорость волны горения, м/с	Максимальное давление, МПа
0.1	11.5	1115	1.2
0.1	2.5	510	0.8
0.1	1	Погасание	

размера частиц засыпки, ограничивающие снизу область горения, оказались ниже тех, что наблюдались в эксперименте, а расчетные скорости волны горения более высокими. Во-вторых, в работах, посвященных опытам с засыпками, нет информации о галопирующем режиме, который дали расчеты. Правда, что-то похожее на галопирующий режим наблюдалось в работе [14] в опытах по распространению детонационной волны по газу (ацетилено-воздушные смеси) в капиллярах.

Сравнивая условия течения реагирующего газа в пористой засыпке и капилляре, можно предположить, что причиной, подавляющей галопирующий режим при распространении волны горения в пористой среде, является значительно более сильная неоднородность распределения характеристик газа, и, прежде всего, температуры на мезо-уровне, т.е. в масштабе струй газа, обтекающих

отдельные частицы засыпки. В расчетах скорость химического превращения газа вычисляется по осредненной температуре, тогда как в реальности химическое превращение газа может начаться и проходить с более высокой скоростью в отдельных очагах, имеющих более высокую температуру, чем осредненное значение. Отсюда можно предположить, что брутто-кинетические константы вырожденного типа, т.е. с более низкой энергией активации, дадут лучшие результаты при численном моделировании горения газа в засыпке, чем кинетические коэффициенты, отвечающие экспериментальным данным по воспламенению в ударной трубе (набор кинетических констант  $K_1$ ), т.е. в достаточно однородном газе.

Чтобы проверить это предположение, мы провели расчеты с набором констант  $K_2$ . Результаты расчетов приведены в табл. 4 и на рис. 5 и 6. Видно, что вместо галопирующего режима, как и в экспериментах, процесс выходит на сверхзвуковой режим горения с постоянной скоростью. Также улучшилось согласие расчетов с экспериментом по уровню скорости волны и предельным условиям горения.

Наконец, из анализа результатов расчетов вытекает замечание относительно структуры волн сверхзвукового горения. В литературе [2, 5] все волновые процессы, распространяющиеся со скоростями от 500 м/с и выше, то есть, являющиеся сверхзвуковыми по отношению к исходному неподвижному газу в порах, отнесены к детонации. На самом деле, по крайней мере, для волновых процессов, имеющих скорость не выше 1000 м/с, скорость волны оказывается заметно ниже скорости звука в продуктах горения (около 1100 м/с). На рис. 6 можно видеть, что в волне горения, имеющей скорость около 510 м/с, число Маха  $M$  сохраняет низкое значение, около 0.45, не только в зоне реакции, но и в области течения, где химическое превращение уже прекратилось и  $Y = 1$ . Таким образом, рассматриваемый процесс не имеет одного из основных признаков детонации и, следовательно, формально не может быть отнесен к детонации. Вопрос о природе этого режима требует специального изучения.

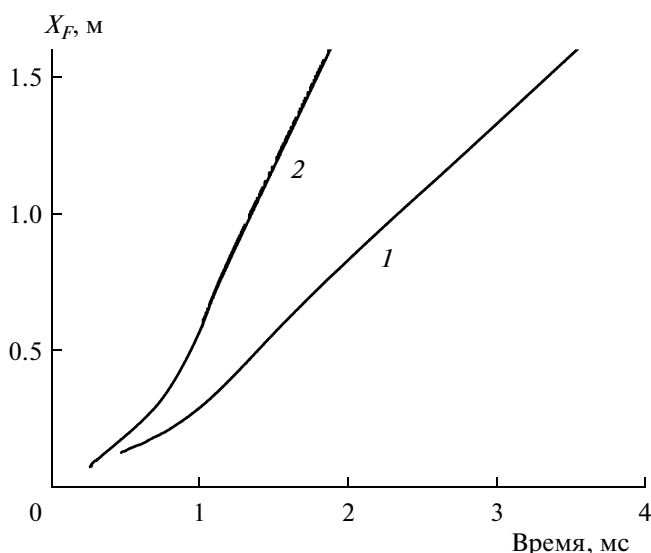
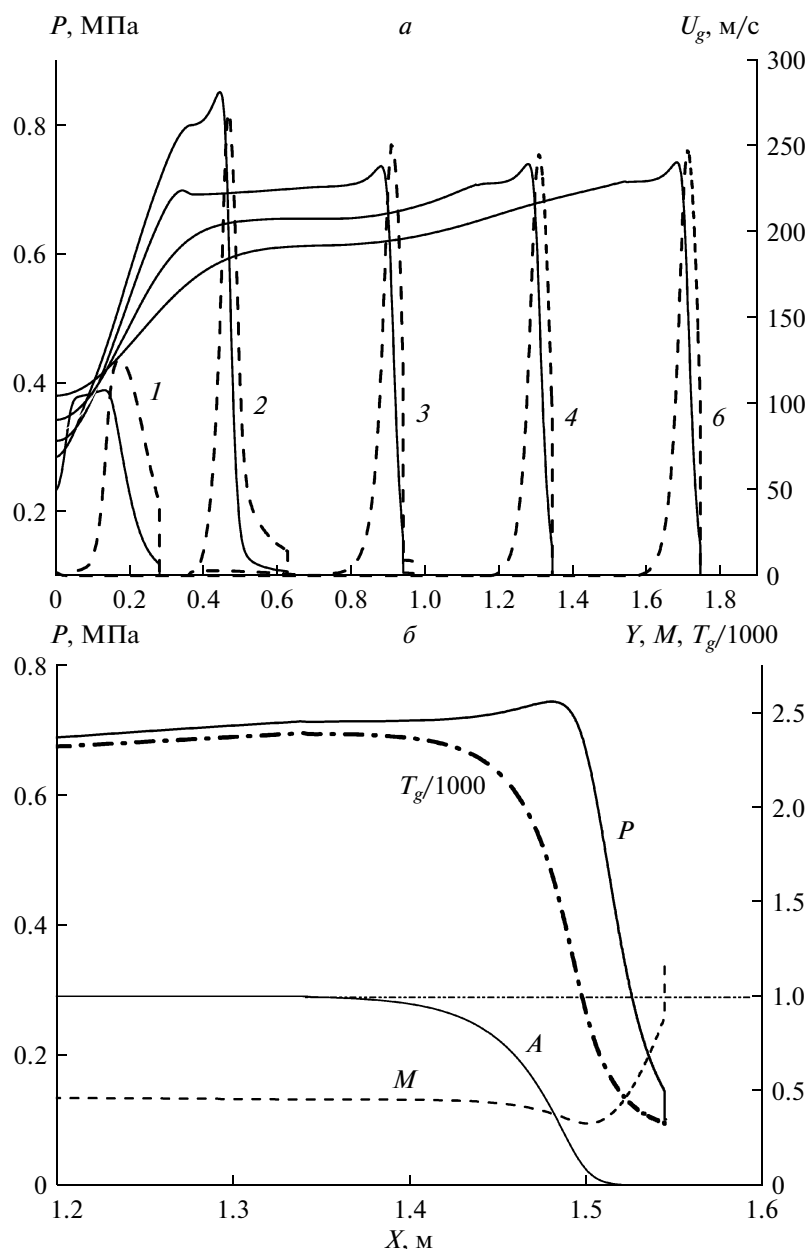


Рис. 5. Траектории фронта горения с выходом на установившийся режим. Край засыпки 0.02 м. Газовая смесь с 35% водорода, вариант с кинетикой  $K_2$ , начальное давление 0.1 МПа, диаметр частиц 2.5 мм (1 — скорость 510 м/с) и 11.5 мм (2 — скорость 1115 м/с).



**Рис. 6.** Сверхзвуковое горение с выходом на установившуюся скорость 510 м/с. Газовая смесь с 35% водорода, вариант с кинетикой  $K2$ , начальное давление 0.1 МПа и диаметр частиц 2.5 мм. Край засыпки 0.02 м. Пространственные профили давления  $P$  и скорости газа  $U_g$  в различные моменты времени с шагом 0.4 мс (а). Структура волны в виде профилей давления ( $P$ ), температуры газа ( $T_g$ ), числа Маха ( $M$ ) и доли сгоревшего газа ( $Y$ ) в момент времени 3.3 мс (б).

### ВЫВОДЫ

Представлены результаты численного моделирования волн горения и детонации, распространяющихся по неподвижной газовой смеси в пористых инертных засыпках. Расчеты проводились в одномерном приближении с помощью компьютерной программы ЕFAE, разработанной в рамках механики многофазных реагирующих сред и опробованной на задачах инициирования и распространения детонации в газовых, двухфазных и конденсированных средах. Химическое превра-

щение газа моделируется глобальной одностадийной реакцией Аррениуса типа с константами, которые подбираются, исходя из имеющихся экспериментальных данных по задержкам воспламенения за отраженными ударными волнами.

Конкретные вычисления выполнены для двух водородо–воздушной смесей, содержащих 35 и 15% водорода, с варьированием начального давления газа, диаметра частиц засыпки и констант скорости реакции. Результаты расчетов сопоставлены с литературными экспериментальными

данными. С помощью численного моделирования удалось получить все 3 режима горения (медленное, быстрое и сверхзвуковое), которые наблюдаются в эксперименте, а также погасание при условиях, ниже пороговых. Кроме того, расчеты качественно воспроизводят экспериментальные данные по изменению режима горения при переходе от стехиометрии к бедной смеси, и по зависимости скорости волны горения и предельных условий смены режима и погасания от начального давления и размера частиц засыпки.

Расчеты для сверхзвукового горения, проведенные с кинетическими константами, отвечающими экспериментальным задержкам воспламенения, показали, что в некотором диапазоне начальных условий возникает галолирующий режим горения, который в экспериментах с пористыми засыпками не наблюдается. В расчетах, проведенных с набором кинетических констант, отвечающих вырожденной брутто-кинетике, вместо галолирующего режима было получено сверхзвуковое горение с постоянной скоростью; одновременно улучшилось согласие с экспериментальными характеристиками волны.

Согласие и расхождение результатов численного моделирования с экспериментом, а также расчетные данные по эволюции и пространственной структуре волн горения и детонации газа в пористой среде дают новый материал для размышлений и анализа. К примеру, сверхзвуковые волны, распространяющиеся со скоростью ниже 1100 м/с, не имеют поверхности Чепмена–Жуге в конце зоны реакции и, очевидно, их нельзя относить к детонации, как это делается в цитируемой литературе.

В дальнейшем работа по численному моделированию режимов горения газовых смесей в пористой среде будет продолжена. Планируется перейти от глобальной одностадийной реакции Аррениусова типа к многостадийной глобальной кинетике, а также провести расчеты для активных

засыпок, состоящих из частиц энергетических материалов (тэн, зерненные пороха).

Авторы выражают искреннюю признательность С.П. Медведеву за интерес к работе и полезные обсуждения.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Попов О.Е., Козарко С.М., Фотеенков В.А. // Докл. АН СССР. 1975. Т. 219. С. 592.
2. Мамонтов Г.М., Митрофанов В.В., Субботин В.А. // Хим. физика процессов горения и взрыва. Детонация. Материалы VI Всесоюзн. симп. по горению и взрыву. Алма-Ата. 1980. С. 106.
3. Лямин Г.А., Пинаев А.В. // Физика горения и взрыва. 1986. Т. 22. № 5. С. 64.
4. Лямин Г.А., Митрофанов В.В., Пинаев А.В., Субботин В.А. Материалы VIII Всесоюзн. симп. по горению и взрыву. Ташкент, 1986. С. 52.
5. Пинаев А.В., Лямин Г.А. // Физика горения и взрыва. 1989. Т. 25. № 4. С. 77.
6. Пинаев А.В. // Физика горения и взрыва. 1994. Т. 30. № 4. С. 52.
7. Mujeebi M.A., Abdullah M.Z., Mohamad A.A., et al. // J. Environmental Management. 2009. V. 90. issue 8. P. 2287.
8. Коржавин А.А., Бунев В.А., Бабкин В.С. // Физика горения и взрыва. 1997. Т. 33. № 1. С. 24.
9. Khasainov B.A., and Veysiere B. // Shock Waves. 1996. V. 6. P. 9.
10. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. М.: Наука Пресс, 1987.
11. Viktorov S.B., Gubin S.A. // 13 (Intern.) Symp. on Detonation, Norfolk. VA. USA, 2006.
12. Гельфанд Б.Е., Попов О.Е., Чайванов Б. Б. Водород: Параметры горения и взрыва. М.: Физматлит, 2008.
13. Смехов Г.Д. // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2009. Т. 8. С. 1. <http://chemphys.edu.ru>
14. Манжалеи В.И. // Физика горения и взрыва. 1999. Т. 35. № 3. С. 89.