

СОДЕРЖАНИЕ

Том 41, номер 8, 2022

Горение, взрыв и ударные волны

**Михалкин В.Н., Сумской С.И., Тереза А.М.,
Трошин К.Я., Хасайнов Б.А., Фролов С.М.**

Воспламенение, горение и детонация газофазных
и гетерогенных смесей (*Обзор*) 3

**Герасимов Г.Я., Козлов П.В., Забелинский И.Е.,
Быкова Н.Г., Левашов В.Ю.**

Исследование радиационных характеристик высокотемпературных газов,
проведенное в ударных трубах 17

**Котов М.А., Козлов П.В., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю., Шемякин А.Н.,
Соловьев Н.Г., Якимов М.Ю., Глебов В.Н., Дуброва Г.А., Малютин А.М.**

Регистрация воспламенения горючей смеси в ударной трубе
с помощью термоэлектрического детектора 31

Кривошеев П.Н., Новицкий А.О., Пенязьков О.Г.

Эволюция структуры и формы фронта реакции при ускорении пламени
и переходе горения в детонацию 38

Порошина Я.Э., Лопато А.И., Уткин П.С.

Характеристический анализ динамики распространения ударной волны
в среде с неравномерным распределением плотности 48

Рогачев С.А., Шкадинский К.Г., Кришеник П.М.

Исследование горения слоевых конденсированных сред с учетом
диффузионного смешения реагентов 59

**Тереза А.М., Агафонов Г.Л., Андержанов Э.К., Бетев А.С.,
Медведев С.П., Хомик С.В.**

Численное моделирование характеристик самовоспламенения
бедных смесей H_2 –воздух 66

Трошин К.Я., Рубцов Н.М., Цветков Г.И., Черныш В.И., Шамшин И.О.

Инициирование горения водородовоздушных смесей металлическим родием
и смесей водород–метан/этан/этилен–воздух родием и палладием
при давлениях 1–2 атм 74

Туник Ю.В., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю., Майоров В.О., Ассад М.С.

Инициирование стабильного детонационного горения паров керосина
за наклонной ударной волной в условиях разреженной атмосферы 81

**Хомик С.В., Иванцов А.Н., Медведев С.П., Андержанов Э.К., Гук И.В.,
Михайлин А.И., Сильников М.В., Васильева С.Н., Тереза А.М.**

Ослабление сферической ударной волны перфорированной перегородкой
в конической ударной трубе 88

**Цветков М.В., Кислов В.М., Цветкова Ю.Ю., Зайченко А.Ю.,
Подлесный Д.Н., Седов И.В., Салганский Е.А.**

Термодинамическая оценка режимов окислительной конверсии продуктов
пиролиза древесины с получением водорода и синтез-газа 93

**ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ**

УДК 533.6.07

ПОСВЯЩАЕТСЯ ПАМЯТИ ПРОФЕССОРА А.А. БОРИСОВА

**ВОСПЛАМЕНЕНИЕ, ГОРЕНИЕ И ДЕТОНАЦИЯ ГАЗОФАЗНЫХ
И ГЕТЕРОГЕННЫХ СМЕСЕЙ
(ОБЗОР)**© 2022 г. В. Н. Михалкин¹, С. И. Сумской², А. М. Тереза^{3*}, К. Я. Трошин³,
Б. А. Хасаинов⁴, С. М. Фролов^{2,3}¹Академия государственной противопожарной службы МЧС России, Москва, Россия²Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия³Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук,
Москва, Россия⁴Национальный центр научных исследований, Пуатье, Франция

*E-mail: tereza@chph.ras.ru

Поступила в редакцию 12.01.2022;

после доработки 15.03.2022;

принята в печать 21.03.2022

В обзоре представлены основные работы профессора А.А. Борисова. Материал написан в виде отдельных разделов, его учениками и коллегами, в которых рассмотрены детонационные процессы в реагирующих газовых средах и в системах с неоднородным тепловыделением. Рассмотрена также целесообразность использования детонационных режимов в авиационных и ракетных двигателях. Кроме этого, представлены результаты математического моделирования параметров воздушных ударных волн и обсуждены вопросы химической кинетики. На основе экспериментального изучения вихревых потоков сформулирован подход к анализу формирования горячих точек в реальных устройствах горения топлив. Отдельная часть посвящена кинетике химических превращений и их роли в изучении и прогнозировании процессов горения.

Ключевые слова: детонация, ударная волна, задержка воспламенения, горение, химическая кинетика, численное моделирование, вихревые потоки.

DOI: 10.31857/S0207401X2208009X

ВВЕДЕНИЕ

В августе 2022 года исполняется 90 лет со дня рождения профессора А.А. Борисова. Прошедшие после его кончины годы позволили в полной мере осознать и оценить, какую потерю понесла наука о горении и взрыве. Выполненные под его руководством и при непосредственном участии исследования позволили ему занять достойное место в сообществе ученых, занимающихся химической физикой и физикой горения и взрыва.

Научные интересы А.А. Борисова были сосредоточены на теоретических и экспериментальных исследованиях процессов самовоспламенения и детонации газовых и гетерогенных систем. Вот, что писал Анатолий Александрович по этому поводу в своей докторской диссертации [1]: “Теория самовоспламенения и теория детонации входят в основы науки о горении газообразных систем. Особую роль в понимании этих явлений

сыграла идея цепных реакций и теплового самоускорения реакций, выдвинутая академиком Н.Н. Семеновым. Эта идея не только дала полное объяснение сложных явлений самовоспламенения, но и послужила одним из отправных положений теории детонации, сформулированной в основных чертах академиком Я.Б. Зельдовичем. К настоящему времени можно считать вполне доказанным, что оба процесса действительно имеют глубокую внутреннюю связь и что детонационная волна представляет собой волну воспламенения, которая распространяется в комплексе с ударной волной, рожденной за счет выделения энергии при реакции”.

Начиная с конца 50-х годов прошлого века А.А. Борисов, будучи еще инженером лаборатории профессора С.М. Когарко, начал изучать кинетику протекания химических реакций в условиях высоких температур [2]. С использованием

методики ударной трубы было исследовано воспламенение гептана в падающих и отраженных ударных волнах. Проведя теоретический и расчетный анализ распространения ударных волн в реагирующей среде и используя собственные экспериментальные результаты авторы работы [2] смогли определить области применимости ударных труб для исследования химических реакций. В работе [3] оптическими методами регистрации температуры было исследовано тепловыделение при реальном течении газа в ударной трубе и показано влияние на него нарушения одномерности течения в зависимости от различных газодинамических факторов и неравновесной химической кинетики. Полученный в ранних работах опыт изучения физико-химических процессов за ударными волнами позволил проф. А.А. Борисову создать свою научную школу, объединяющую исследователей в области газофазного и гетерогенного горения топлив, ударных волн и детонации.

Настоящий обзор составлен на основе написанных учениками и коллегами проф. А.А. Борисова разделов и последних достижений, посвященных основным направлениям его научной деятельности.

ДЕТОНАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В РЕАГИРУЮЩИХ ГАЗОВЫХ СРЕДАХ

Для детонационных процессов и течения реагирующих сред наиболее характерным является наличие так называемых критических и нестационарных явлений, рассмотрение которых должно быть проведено с учетом как кинетики химических процессов, происходящих в реакционной нагретой среде, так и конвективного и кондуктивного массопереноса, а также различных газодинамических возмущений, проявляющихся в виде ударных волн и волн разрежения. Вследствие сложности этих процессов, их неравновесности и нестационарности современные методы моделирования позволяют решать только отдельные задачи с течением реагирующих сред с экзотермическими и эндотермическими реакциями, и то в значительной мере упрощенные. Поэтому Анатолий Александрович основное внимание в изучении этих явлений уделял экспериментальным исследованиям. Полученные под его руководством новые экспериментальные данные имеют не только фундаментальное научное, но и прикладное значение для техники взрывобезопасности и усовершенствования установок на основе детонационных режимов.

Под руководством Анатолия Александровича были разработаны установки, на которых проведены экспериментальные исследования пределов детонации топливно-воздушных смесей (ТВС) в гладких и шероховатых трубах [4], а также в плоских каналах типа щели [5, 6]. В работе [4] показа-

но, что истинные пределы детонации в гладких трубах довольно близки к пределам распространения пламени, особенно для бедных смесей углеводородов с воздухом. Установлено, что пределу всегда предшествует область неустойчивых режимов с пульсирующей скоростью. Слабая зависимость пределов детонации в трубах от энергии инициирования и от диаметра трубы, когда последние превышают некоторые значения, позволяет, по крайней мере для ограниченного диапазона изменения этих параметров, говорить о пределах детонации как о характеристике только смеси. В то же время, в существующих теоретических моделях пределов детонации независимость концентраций на пределе от диаметра трубы не подтверждена, поэтому необходимо их дополнение.

Экспериментально исследованы критические явления при распространении детонации по каналам сложной конфигурации, а именно переход детонации из трубы в расширяющейся конус. Получена эмпирическая зависимость критического диаметра перехода от угла раствора конической трубы и критического выхода детонации из трубы в свободный объем [7], согласно которой при угле раствора конической трубы больше 60° критический диаметр перехода детонации из трубы постоянного сечения в коническую расширяющуюся трубу перестает зависеть от угла раствора конической трубы.

Для теории детонации и техники взрывобезопасности большое значение имеет изучение явления детонации в свободном заряде без оболочки. Изучение такого вида детонации полезно для понимания структуры газовой детонации, ее устойчивости, природы предельных явлений. Количественные характеристики такой детонации необходимы при оценке возможности распространения детонационного процесса в облаках газовых смесей сложной конфигурации, которые могут образоваться при аварийных выбросах горячего в атмосферу. Под руководством проф. А.А. Борисова была разработана установка для исследования детонации в свободном цилиндрическом газовом заряде [8], в которой последний формировался в твердой оболочке путем продувки ее горючей газовой смесью из разгонной детонационной трубы, установленной вертикально, а затем твердая оболочка падает под действием силы тяжести. При проведении исследования распространения детонации по свободным цилиндрическим зарядам стехиометрических ацетиленокислородных смесей, разбавленных азотом, была получена детонация в ацетилено-воздушной смеси и показано, что отношение критического диаметра детонации свободного заряда к критическому диаметру выхода детонации из трубы в объем не является постоянным, а уменьшается с ростом величины последнего [9].

В дальнейших работах [10–12] проводились исследования детонации в свободных зарядах различных углеводородов. Было показано, что при приближении диаметра свободного заряда к критическому для исследуемой смеси скорость детонации уменьшается и проявляется пульсирующий характер движения с периодическим инициированием смеси на периферии заряда. Характерный размер ячейки многофронтной детонации увеличивается при распространении процесса в свободном заряде по сравнению с распространением в заряде с жесткими стенками. Для критического диаметра распространения детонации в свободном заряде, $d_{кр.св}$, получена эмпирическая зависимость:

$$d_{кр.св}/d_{кр} = A + B/d_{кр} - C/d_{кр}^2,$$

где $d_{кр}$ – критический диаметр выхода детонации из трубы в объем; а A , B и C – численные коэффициенты, равные соответственно 1.55 ± 0.05 , 40 мм и 7 мм². Также было показано, что истечение детонирующей смеси в атмосферу создает область вне установки, по которой может распространяться детонация из отверстия протяженностью, не превышающей четырех диаметров отверстия [11, 12].

В работе [12] было проведено экспериментальное исследование распространения детонации в слое горючей смеси над жесткой поверхностью на установке, представляющей собой плоский канал, боковая поверхность которого перед инициированием детонации в горючей смеси, заполняющей этот канал, удалялась. В результате образовывался газовый заряд со свободной поверхностью, моделирующий слой горючей смеси над жесткой поверхностью. Исследовались ацетилено-воздушная и водородно-воздушная смеси стехиометрического состава. Показано, что критическая высота слоя горючей смеси для распространения детонации составляет половину критического диаметра распространения детонации в свободном заряде.

Проведенные экспериментальные исследования по дифракции детонационных волн позволили разработать полуэмпирическую формулу для оценки критической энергии инициирования детонации зарядов любой геометрической формы на основе измеренных критических диаметров для перехода детонации из трубы в неограниченный объем. Формула довольно хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными [13, 14].

ДЕТОНАЦИЯ В СИСТЕМАХ С НЕМОНОТОННЫМ ТЕПЛОВЫДЕЛЕНИЕМ

В непосредственной связи с исследованиями низкоскоростной детонации (НСД), традиционно проводимыми в лаборатории, проф. А.А. Бо-

рисова живо интересовал вопрос о влиянии реакций, происходящих за фронтом НСД, на устойчивость последней. Эта проблема представляет собой частный случай детонации в системах с немонотонным тепловыделением. Стационарные модели детонации предсказывают [15], что в таких системах возможно устойчивое распространение как нормальной, так и низкоскоростной детонации. Однако предпринятое нами аналитическое исследование [16] влияния экзотермических реакций за точкой Чепмена–Жуге (ЧЖ) на стабильность детонации показало, что возможны условия, при которых эволюция вторичной волны сжатия, обязанной реакциям догорания за точкой ЧЖ, приведет к формированию вторичной ударной волны, догоняющей фронт низкоскоростной детонации и нарушающей ее стабильность.

Ярким примером систем с немонотонным тепловыделением являются двухфазные смеси взвешенных частиц алюминия в газовом взрывчатом веществе, в которых Б. Вейссьер наблюдал двухфронтную детонацию [17]. В работе [18] была предложена теоретическая стационарная модель двухфронтной детонации, хорошо согласующаяся с экспериментом. Позже была разработана нестационарная модель детонации в таких гибридных смесях, что позволило визуализировать процесс формирования вторичной детонации (см. рис. 1) для случая частиц алюминия диаметром 13 мкм. В случае частиц Al размером около 1 мкм вторичная волна быстро догоняет лидирующий фронт и приводит в конце концов к распространению “нормальной” детонации, соответствующей полному тепловыделению [19].

Еще один пример систем с немонотонным тепловыделением – это газовые взрывчатые смеси нитрометана с тетранитрометаном [20], в которых наблюдается двухуровневая ячеистая структура. Численный пример такой структуры показан на рис. 2 [21]. Интересно, что и в таких газовых смесях возможно распространение низкоскоростной детонации, соответствующей первому этапу реакции (рис. 3). Однако эволюция вторичной волны сжатия, обязанной второму этапу реакции, в конце концов приводит к переходу НСД в нормальную детонацию, соответствующую полному тепловыделению. При наличии достаточно сильных потерь в стенку трубы, которые здесь не учитывались, была бы возможна стабилизация НСД.

Фундаментальная работа проф. А.А. Борисова и соавт. [22], посвященная экспериментальному и теоретическому исследованию детонации взвеси алюминия в воздухе и кислороде, положила начало циклу аналогичных исследований во Франции и Канаде (см., например, работы [23–25]).

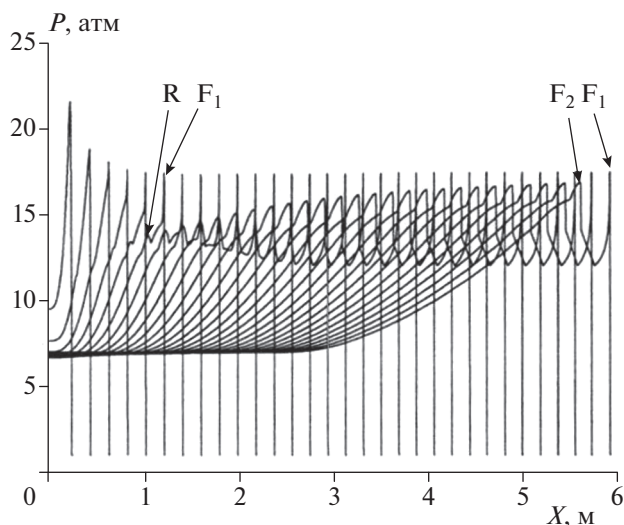


Рис. 1. Расчетная эволюция детонационной волны в бедной водородо-воздушной смеси при концентрации частиц алюминия 70 г/м^3 . Размер частиц – 13 мкм ; F_1 – первичный фронт, F_2 – вторичный фронт, R – вторичная волна сжатия.

Интересы А.А. Борисова не ограничивались исследованием детонации лишь газовых и двухфазных систем. В 1981 году им с коллегами была предложена неформальная двухфазная вязкопластическая модель инициирования высокоплотных твердых взрывчатых веществ (ВВ) [26], которая впоследствии была включена во многие газодинамические коды для численного моделирования детонации твердых ВВ. Главное преимущество этой модели состоит в том, что она, в соответствии с экспериментальными данными, учитывает, что микроструктура взрывчатых веществ ВВ различным образом влияет на их чувствительность к воспламенению и к процессу горения, что

детально проиллюстрировано в обзоре [27]. Кроме того, в обзоре [28] на основе вязкопластической модели образования горячих точек [26] было дано объяснение всему комплексу экспериментальных данных об обращении ударно-волновой чувствительности твердых ВВ, согласно которым при высоких давлениях мелкозернистое ВВ является более чувствительным, чем крупнодисперсное, а при низких давлениях ударной волны ситуация меняется на обратную.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДЕТОНАЦИОННЫХ РЕЖИМОВ В АВИАЦИОННЫХ И РАКЕТНЫХ ДВИГАТЕЛЯХ

В работе [29] проведен сравнительный анализ термодинамических циклов энергетических установок, работающих на горении (циклы с горением при постоянном давлении $P = \text{const}$ и при постоянном объеме $V = \text{const}$) и на детонации (цикл Зельдовича) топлива. В качестве топлива, моделирующего керосин с соотношением атомов водорода и углерода, близким к 2, рассмотрен этилен. На рис. 4 представлены расчетные зависимости термодинамического коэффициента полезного действия (КПД) циклов, η , от степени π (≥ 1) предварительного сжатия топливно-воздушной смеси. Максимальная термодинамическая эффективность превращения химической энергии топлива в полезную работу достигается в цикле Зельдовича, причем КПД цикла с горением при постоянном объеме $V = \text{const}$ на несколько процентов ниже, а КПД цикла с горением при постоянном давлении $P = \text{const}$ – существенно ниже, особенно при малых значениях π . Предварительное сжатие смеси увеличивает КПД всех рассматриваемых циклов, однако цикл Зельдовича остается наиболее энер-

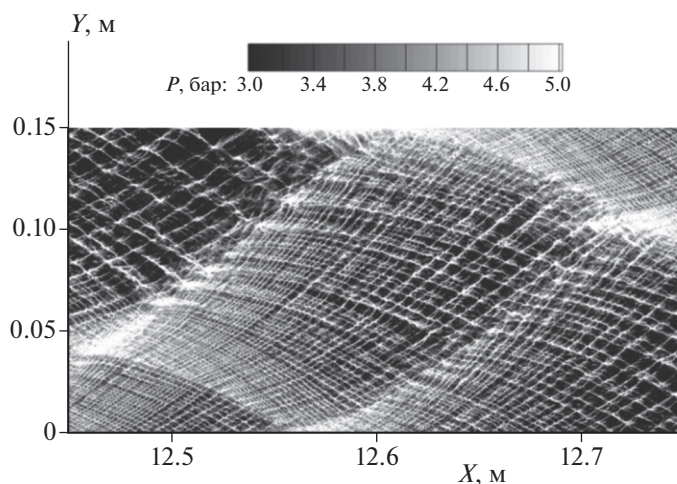


Рис. 2. Базовый случай двухстадийного тепловыделения: $A \rightarrow B$, $B \rightarrow C$, рассмотренного в [21].

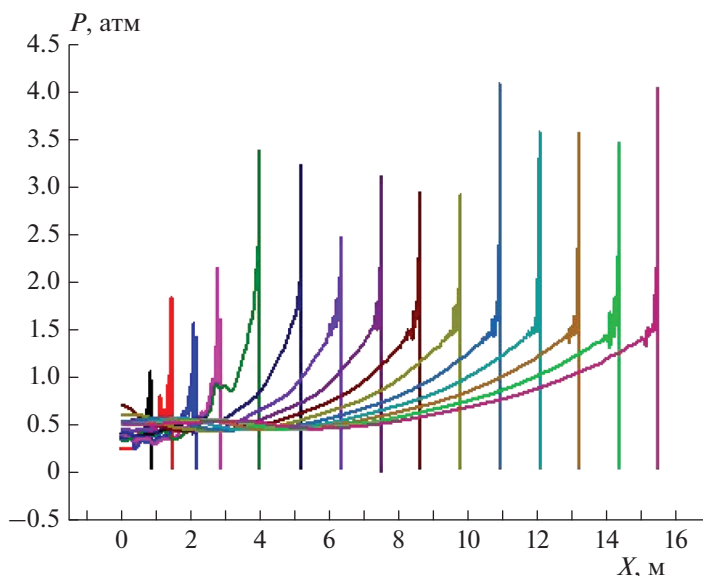


Рис. 3. Профили давления в процессе слабого инициирования детонации в газовом взрывчатом веществе при двухстадийной реакции [21].

гоэффективным даже при очень больших значениях π .

Преимущества цикла Зельдовича можно продемонстрировать на следующем примере. Представим себе силовую машину, в которой реализован цикл с горением топлива при $P = \text{const}$ с $\pi = 50$ (точка 1 на рис. 4). Переход к циклу Зельдовича при прочих равных условиях (переход из точки 1 в точку 2) позволил бы увеличить КПД с 54% до 62%, т.е. совершаемая работа увеличилась бы на 15%! Переход к циклу Зельдовича при сохранении совершаемой работы (переход из точки 1 в точку 3) позволил бы уменьшить степень сжатия от 50 до 20, т.е. в 2.5 раза! Выводы, сделанные в работе [29], уже нашли экспериментальное подтверждение в испытаниях моделей жидкостных ракетных двигателей [30], форсажных камер сгорания [31] и прямоточных воздушно-реактивных двигателей [32].

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ВОЗДУШНЫХ УДАРНЫХ ВОЛН

Математическое моделирование параметров воздушных ударных волн, образующихся при взрывных процессах, является важной научно-практической задачей. Практическая значимость этих работ очевидна: необходимо точно оценивать последствия воздушных взрывов (здесь и далее под взрывом понимается как детонация, так и различные дефлаграционные режимы, включая турбулентные и диффузионные). С научной точки зрения эта задача представляет собой комплексную проблему, включающую в общем случае математическое описание турбулентного гетерогенного

течения сжимаемой многокомпонентной химически реагирующей излучающей среды.

Для корректного моделирования генерируемых в воздухе волн давления необходимо правильно учесть три основных фактора:

- количество выделившейся энергии;
- скорость энерговыделения;

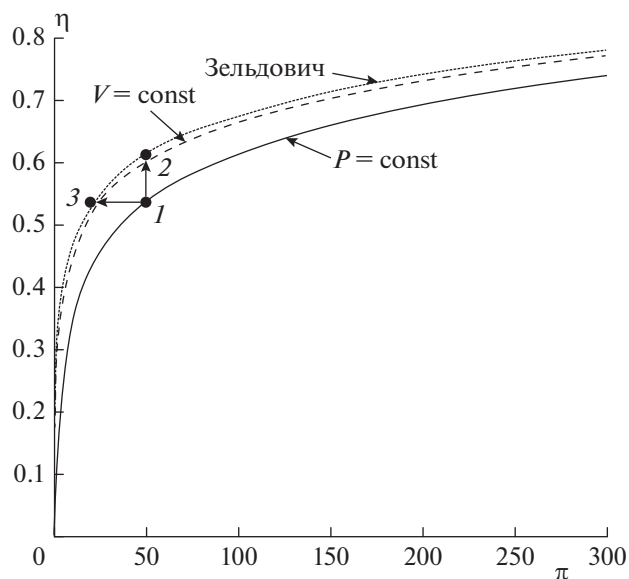


Рис. 4. Расчетные зависимости термодинамического КПД различных циклов (η) от степени предварительного сжатия $\pi \geq 1$ топливно-воздушной смеси (пояснения см. в тексте).

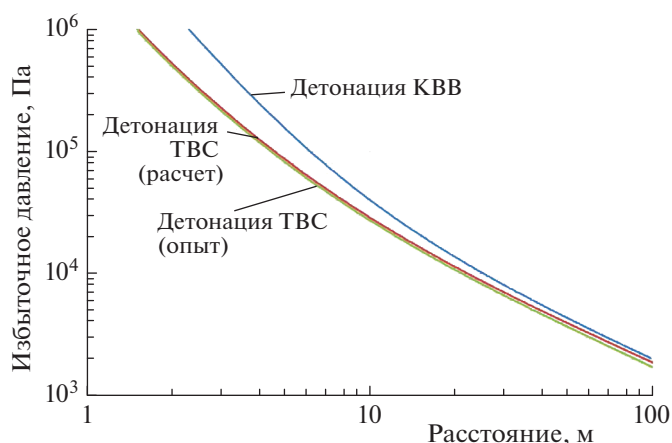


Рис. 5. Зависимость избыточного давления от расстояния при детонации стехиометрической смеси водород–кислород в сферическом облаке радиусом 1.5 м в свободном объеме. “Детонация ТВС (опыт)” – аппроксимация опытных данных из работ [37, 38], “Детонация ТВС (расчет)” – расчет [35], “Детонация КВВ” – зависимость для взрыва эквивалентного заряда тротила [33].

– пространственное распределение топлива в ходе энерговыделения.

В зависимости от сочетания этих факторов возможно формирование волн в широком диапазоне параметров. В простейшем случае (взрывы конденсированных ВВ, расширение компактно сжатого газа) для описания параметров волн достаточно знать только количество выделившейся энергии [33, 34]. При возможности реализации в системе различных режимов энерговыделения, например детонации или дефлаграции, необходимо учитывать и второй из перечисленных факторов – скорость энерговыделения (скорость распространения детонации или, соответственно, дефлаграции) [35]: при детонации ТВС генерируются ударные волны с более высоким давлением на фронте, чем при дефлаграции, однако при дефлаграции больше продолжительность фазы сжатия.

Наконец, третий фактор существен в двух аспектах влияния на параметры воздушных смесей: во-первых, начальные размеры областей, занятых ТВС, уже сами по себе определяют характер разгрузки продуктов и, соответственно, параметры волн давления; а во-вторых, движение непрореагировавшего до конца топлива (особенно при наличии конденсированной фазы) и постепенное его смешивание с воздухом могут приводить в процессе догорания к усилению ударных волн.

В работах проф. А.А. Борисова с коллегами математическое моделирование параметров волн давления занимает большое место. Оно проводилось в основном для систем “воздух–газ”, “воздух–конденсированная взвесь”, “воздух–пыль, включая твердые распылы окислителя”.

В деятельности проф. А.А. Борисова по теоретическому рассмотрению комплекса вопросов,

связанных с моделированием воздушных волн от взрывов, можно условно выделить два этапа:

– на первом этапе (до середины 1990-х годов) рассматривались взрывы сферических облаков и параметры волн описывались либо простыми параметрическими формулами, либо определялись, исходя из решения одномерных задач;

– на втором этапе рассматривались взрывы сложных гетерогенных систем с растянутым временем энерговыделения; задачи решались в многомерной постановке.

В ранних работах А.А. Борисова [36, 37] было показано, что применение метода тротилового эквивалента (например, в варианте, представленном в работе [33]) для оценки параметров ударных волн от детонирующих газовых облаков требует коррекции. Этот факт проиллюстрирован на рис. 5, где приведена зависимость избыточного давления во фронте ударной волны от расстояния при детонации сферического водородно-кислородного облака стехиометрического состава (данные работ [38, 39]). На этом же рисунке приведены данные по параметрам ударных волн от взрыва эквивалентного заряда тротила [33]. Видно, что имеет место заметное завышение давления при использовании метода тротилового эквивалента.

Для замены формул расчета тротилового эквивалента были предложены параметрические соотношения для оценки параметров волн давления как в фазе сжатия [36], так и в фазе разрежения [37]. На рис. 5 приведены результаты расчета по одной из таких зависимостей [35]. Как видно из этого рисунка, этот подход гораздо лучше соответствует наблюдаемым экспериментальным данным. Эти соотношения продолжают использоваться и по сей день [40]. Пример такого использования показан на рис. 6, где приведены зависимости безраз-

мерного давления ($\Delta P/P_0$, где P_0 — начальное давление в среде, по которой распространяется волна) от безразмерного расстояния $r/(E/P_0)^{1/3}$, где E — количество выделившейся энергии) при различных скоростях горения: от 50 м/с до детонации.

В то же время были разработаны подходы к компьютерному моделированию распространения волн давления при горении и детонации газовых облаков [41–43]. В работе [43] предложен метод расчета параметров волн давления при сгорании сферических облаков с любой скоростью — от низкоскоростных дефлаграций до детонации. В работе [42], в частности, было показано, что при детонации переобогащенных облаков ТВС над поверхностью земли на нижнем крае облака развивается гидродинамическая неустойчивость вследствие взаимодействия горячих продуктов с отраженной от земли ударной волной. Это приводит к подмешиванию в продукты воздуха, дожиганию продуктов детонации и дополнительному энерговыделению, которое в результате усиливает воздушную ударную волну.

В 1990-х и 2000-х гг. научной группой под руководством проф. А.А. Борисова интенсивно проводилось математическое моделирование потоков реагирующих двухфазных смесей как предварительно перемешанных, так и впрыскиваемых в воздух и реагирующих по мере смешивания с ним. Плотности таких смесей рассматривались в диапазоне 2–100 кг/м³, что значительно меньше плотности смесей на основе конденсированных ВВ, но больше обычных плотностей ТВС. Поскольку при таких плотностях кислорода воздуха будет не хватать для полного окисления, в систему включался твердый окислитель в виде частиц нитрата аммония, перхлората аммония. В качестве компонента топлива таких систем рассматривался алюминий. Были изучены характеристики волн давления, образующихся при взрыве как сферических зарядов, так и инжектируемых в воздух смесей, и оценены энергетические эквиваленты таких взрывов [44–48]. Было показано, что пространственное расширение продуктов и их дореагирование при подмешивании воздуха на большем удалении от эпицентра взрыва способствуют генерации более мощных волн [48–51]. На рис. 7 представлены рассчитанные зависимости избыточного давления от расстояния для различных вариантов взрыва гетерогенных зарядов весом 800 г [51]. Для сравнения приведена линия со спадом давления в ударной волне от эквивалентного заряда тротила (линия 1 на рис. 7). Из рис. 7 видно, что при компактном реагировании гетерогенного заряда с содержанием крупных частиц (медленное горение) параметры ударной волны близки к уровню давлений, создаваемых взрывом заряда тротила (линии 1 и 4 на рис. 7). В случае более мелких частиц реагирование в расширя-

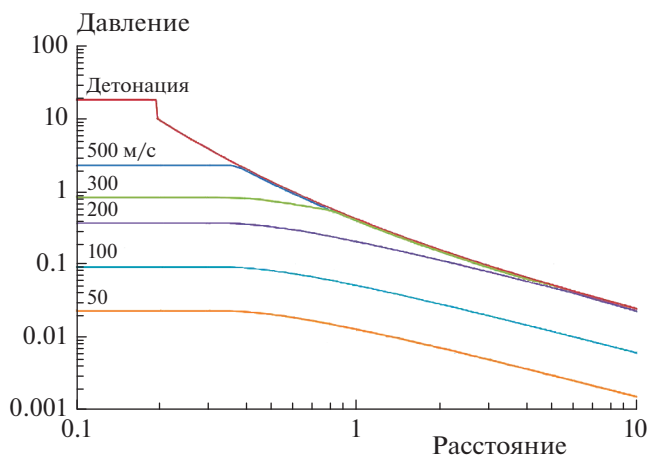


Рис. 6. Зависимость безразмерного давления от безразмерного расстояния при различных режимах энергосвободения: детонации и с указанной на кривых скоростью горения.

ющемся облаке происходит быстрее, что приводит к более высоким давлениям по сравнению со взрывом тротила (линии 1 и 2 на рис. 7). Наконец, еще большие давления достигаются при догорании топливного компонента на некотором расстоянии от начального расположения заряда при подмешивании воздуха в продукты (линии 1 и 3 на рис. 7).

Отдельно моделировалось действие ударных волн, в частности подъем пыли при прохождении ударной волны над ее слоем [52]. Также была изучена излучательная способность облаков высокотемпературных продуктов, образующихся при взрыве гетерогенных смесей [53].

Модели гетерогенных реагирующих потоков, разработанные для открытых пространств, использовались и при решении задач в загроможденном пространстве, в частности при разработке вопросов, связанных с импульсными детонационными двигателями. В работе Борисова с соавт. [29] были показаны достоинства детонационного термодинамического цикла с точки зрения его эффективности с учетом реального состава продуктов. В связи с такой перспективностью использования детонационного цикла в реальных конструкциях был решен ряд задач по моделированию процессов в соответствующих установках. Расчетным путем было показано, что при многоточечном впрыске топлива в трубу, имитирующую реальную конструкцию, достигается хорошая полнота сгорания за приемлемое время, что позволяет создать необходимую силу тяги [54–57].

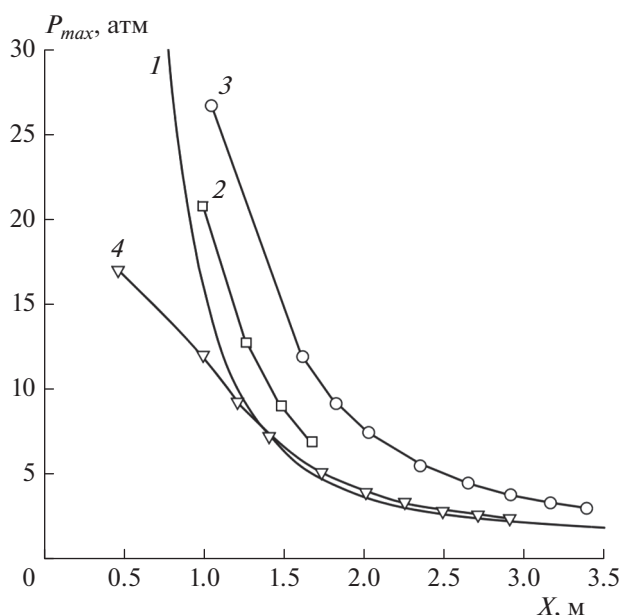


Рис. 7. Рассчитанное давление на фронте взрывной волны для взрыва заряда весом 800 г в зависимости от расстояния: 1 – тротил, расчет по формуле Садовского [33]; 2 – смесь нитрат аммония – алюминий состава 50 : 50, размер частиц обоих компонентов – 1 мкм (быстрое горение, время горения – 0.5 мс), турбулентное смешение не учитывается; 3 – условия те же, что и в расчете 2 за исключением того, что турбулентное смешение включено; 4 – частицы алюминия диаметром 3 мкм, частицы перхлората аммония диаметром 10 мкм (медленное горение).

ПРОЦЕССЫ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ И ДЕТОНАЦИИ ГАЗОВЫХ И ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМ В РАЗЛИЧНЫХ ПОТОКАХ

Метод задержек воспламенения следует отнести к весьма полезным в кинетических измерениях. В лаборатории “взрывных процессов в газах и двухфазных средах” под руководством проф. А.А. Борисова была разработана методика оценки величины критической энергии инициирования детонации в свободном объеме реагирующего газа по задержкам воспламенения [58]. В дальнейшем был выполнен цикл экспериментальных и теоретических исследований кинетики процесса самовоспламенения различных топлив. Большое внимание уделялось исследованию влияния малых активных добавок на воспламенение топлив [59–66]. Такие добавки (промоторы), разлагаясь в ходе реакции, дают активные радикалы, ускоряющие самовоспламенение. Впервые аналитическими методами выполнены исследования процесса воспламенения топлив на примере модельных систем, включающих основные стадии цепного механизма реакций: зарождения, разветвления, продолжения, обрыва цепи, и разложение промотора с учетом тепловыделения реакции. Результаты

исследований показали, что вопреки бытовавшему представлению о том, что чем быстрее в ходе реакции разлагается промотор, тем он эффективнее ускоряет воспламенение топлива, было доказано, что на самом деле эффективность промотора зависит от соотношения констант скоростей элементарных стадий. Иными словами, для различных топлив могут существовать промоторы с оптимальной скоростью разложения [58], обеспечивающие максимальное сокращение периода задержки воспламенения. Аналитическое исследование кинетики цепно-теплового воспламенения позволяет получить общие закономерности процесса и тем самым дает возможность целенаправленного поиска оптимальных промоторов.

Однако для решения конкретных практических задач необходимы достоверные детальные кинетические механизмы. На основе детальных механизмов окисления простейших топлив H_2 и CO А.А. Борисов с соавт. предложили кинетическую схему воспламенения и горения углеводородов от C_1 до C_3 [67, 68]. Особенностью предложенного кинетического механизма является то, что он описывает не только начальную стадию горения в виде задержки воспламенения, но и более позднюю стадию выгорания, на которой происходит образование продуктов сгорания. Некоторые результаты расчетов показаны на рис. 8. Такой механизм дает представление о времени энерговыделения в процессе горения газов.

Достоверная информация о кинетике выделения тепла химической реакции чрезвычайно важна при решении задач, связанных с распространением детонационных волн, как в газовых, так и в гетерогенных средах. Под руководством проф. А.А. Борисова были проведены исследования, позволяющие применить результаты одномерного моделирования детонационных волн с глобальной кинетикой химических реакций к решению некоторых практических задач [68].

В противоположность газовым смесям кинетика энерговыделения в гетерогенных смесях не может быть ограничена применением точно определенных кинетических механизмов, содержащих элементарные стадии, поскольку она зависит от многих физических и химических явлений, влиянием которых нельзя пренебрегать. По этой причине чрезвычайно полезны эмпирические выражения, определяющие глобальную скорость тепловыделения в таких смесях [41]. На основе анализа физических процессов, протекающих в гетерогенных реагирующих средах, получены полуэмпирические соотношения для оценки величины задержек воспламенения в топливно-воздушных смесях как с твердыми, так и с жидкими частицами, а также предложены глобальные соотношения для определения скорости энерговыделения в аэрозолях [41, 68].

Еще в 50–60-е годы прошлого века стало известно, что в ударных трубах и установках быстрого сжатия, предназначенных для кинетических исследований, воспламенение носит очаговый характер, т.е. воспламенение всегда начинается в отдельных очагах и лишь затем волна горения охватывает весь объем. В своей диссертации [1] проф. А.А. Борисов показал, что возникновение очагов воспламенения (горячих точек) задолго до воспламенения всего объема связано, скорее всего, не с особенностями протекания самой экзотермической реакции, а с особенностями способа нагрева смеси до температуры, при которой начинает заметно идти реакция инициирования. Это служит подтверждением точки зрения о газодинамической природе возникновения ранних очагов, для которых задержка воспламенения несколько ниже среднего ее значения.

Позже в экспериментальных исследованиях, выполненных под руководством проф. А.А. Борисова, продемонстрирован очаговый характер воспламенения углеводородов в условиях низких температур в статических установках. На рис. 9 приведены кадры скоростной видеосъемки, наглядно демонстрирующие зарождение очагов воспламенения и развитие фронта пламени в смеси пентана с воздухом стехиометрического состава.

Дальнейшие экспериментальные исследования воспламенения реагирующих газов в вихревых потоках подтвердили предположения А.А. Борисова, высказанные в его диссертационной работе [1]. Им была разработана и создана под его руководством установка с тангенциальным напуском горючей смеси газов в нагретый и откачанный реактор. Это обеспечивало вращение газа в реакторе. Эксперименты показали, что в центре вихря за счет возникновения центробежных сил происходит сосредоточение наиболее легких, т.е. наиболее горячих порций газа. Это является причиной формирования горячих точек в реальных устройствах, в которых традиционно измеряют время задержки воспламенения [69–72]. Явление самовоспламенения реагирующего газа в вихревом потоке необходимо учитывать при создании безопасных условий работы технических устройств, в которых возможно образование вихрей горючих смесей газов. На рис. 10 и 11 показаны кадры скоростной видеосъемки, полученной при самовоспламенении вращающегося реагирующего газа. Обращает на себя внимание то, что температура реактора значительно ниже температуры воспламенения горючего.

В последние годы жизни профессор А.А. Борисов проявлял большой интерес к неклассической малоизученной области науки о горении. Под его руководством было проведено исследование горения сверхбогатых воздушных и кислородных смесей метана и попутных нефтяных га-

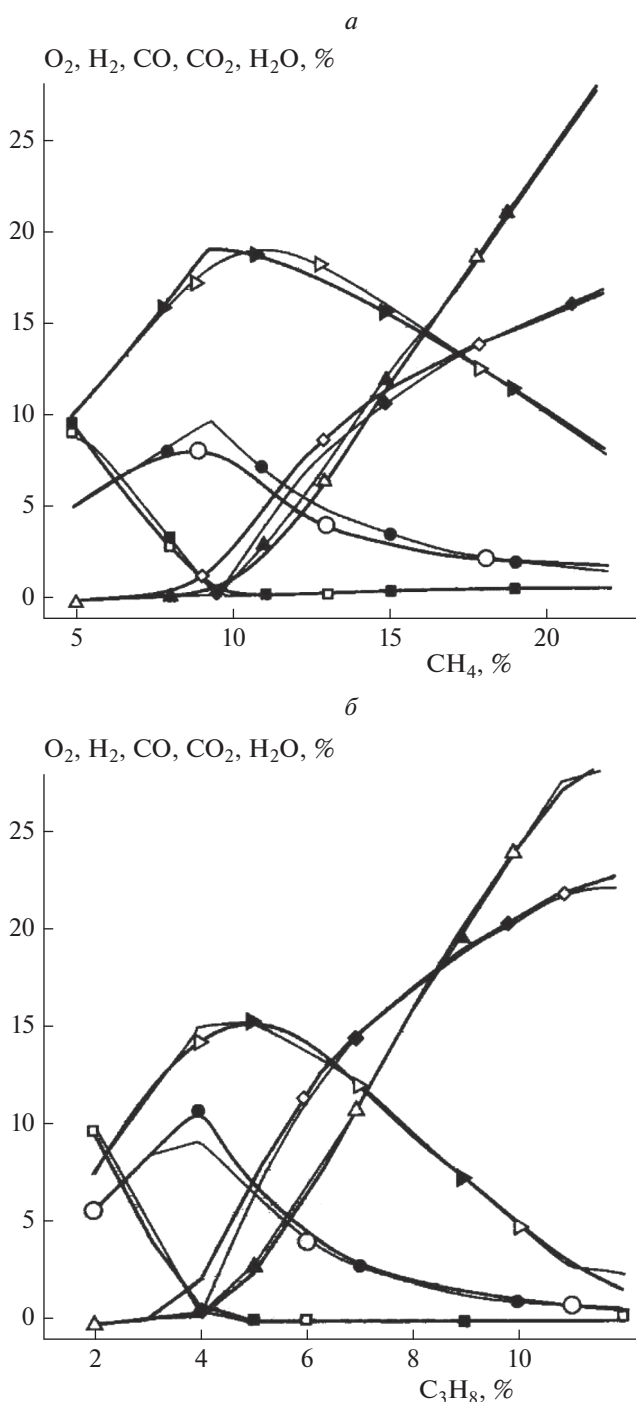


Рис. 8. Кинетический и термодинамический расчет состава продуктов сгорания метана (а) и пропана (б) в воздухе при $V = \text{const}$, $P_0 = 40$ атм, $T_0 = 723$ К: \square – O₂, \triangle – H₂, \diamond – CO, \circ – CO₂, \triangleright – H₂O. Светлые символы – термодинамический расчет, темные – кинетический расчет.

зов [73, 74]. Термин “сверхбогатые” означает, что содержание топлива в таких смесях превышает верхний концентрационный предел воспламенения при нормальных условиях. Такие смеси спо-

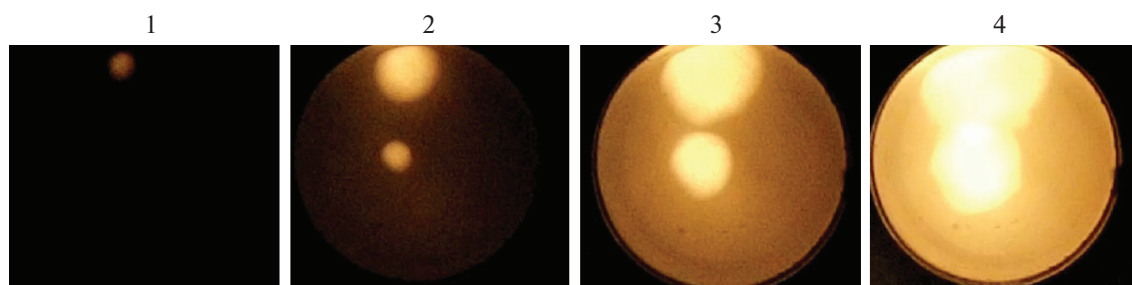


Рис. 9. Зарождение и развитие очагов воспламенения на примере стехиометрической смеси C_5H_{12} в воздухе. Начальное давление – 3 атм, начальная температура – 639 К. Частота съемки – 600 кадров/с. Задержка воспламенения – 0.96 с. Цифры соответствуют номерам кадров.

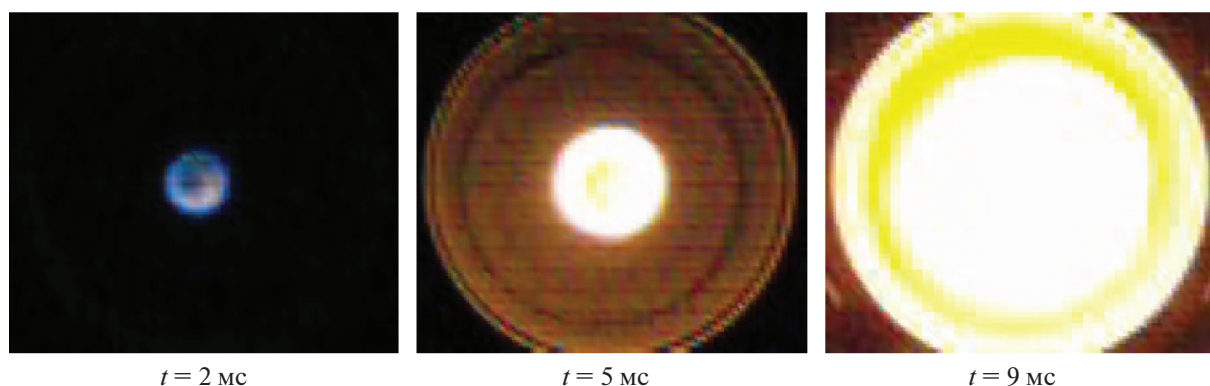


Рис. 10. Развитие очага самовоспламенения во времени (t). Смесь – воздух + 4% C_3H_8 . Температура стенок реактора – 630 К.

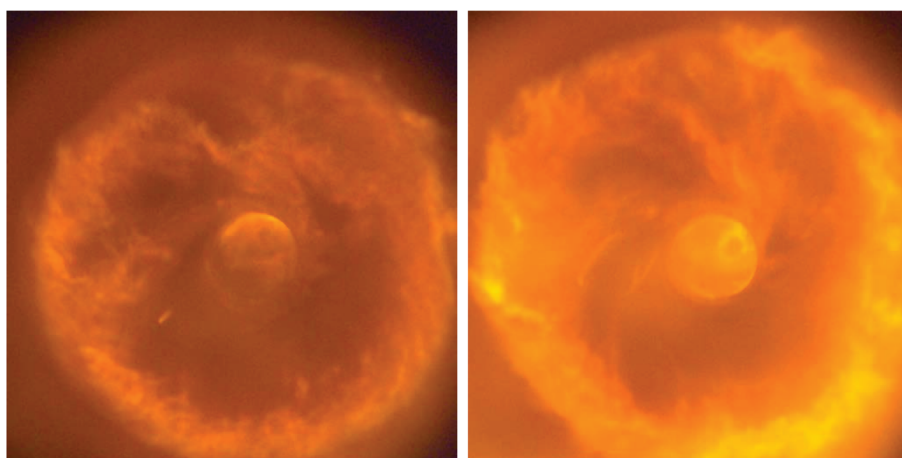


Рис. 11. Очаг самовоспламенения в центре реактора в разные моменты времени. Разница между кадрами – 0.1 мс. Смесь – 40% H_2 + 60% воздуха. Температура стенок реактора – 558 К.

способны гореть только в условиях повышенных давлений и температур. Это малоизученная область горения, поскольку до недавнего времени такие режимы горения не находили применения.

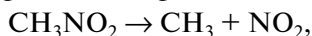
Процесс некаталитического парциального окисления легких углеводородов в режимах горения – перспективное направление развития газо-

химических технологий, получения жидких углеводородных топлив и других продуктов нефтехимии, а также способов получения водорода для развивающейся водородной энергетики. Однако для развития некаталитического способа получения синтез-газа необходимо решить ряд научных и технологических проблем.

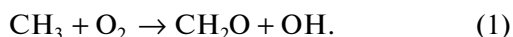
Под руководством профессора А.А. Борисова в установках постоянного объема, адиабатического сжатия и проточном реакторе на базе ракетных технологий экспериментально исследовано получение синтез-газа при горении сверхбогатых метановоздушных и метаноокислородных смесей. Рассмотрены различные способы воспламенения этих смесей, измерены скорости распространения пламени, исследован состав продуктов процесса. Изучено влияние режимов процесса горения на выход конденсированного продукта (сажи) и исследованы его свойства. Найдены пути минимизации выхода сажи. Выполнено сравнение экспериментальных данных, полученных при горении сверхбогатых смесей в различных устройствах. Показано, что основные закономерности, установленные в реакторе одного типа, могут быть использованы при организации процесса в других реакторах. Результаты этих исследований являются научной основой для разработки технологии производства синтез-газа в некаталитических режимах горения.

ИЗУЧЕНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ И ИХ РОЛИ В ПРОМОТИРОВАНИИ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ТОПЛИВ

Измерение значений задержки воспламенения позволяет получить только суммарные кинетические характеристики, по которым можно качественно судить о механизме и скоростях химических реакций [75], тем не менее при достаточно хорошо изученном кинетическом механизме по измеренным температурным зависимостям задержки воспламенения можно определить температурную зависимость констант скорости ведущих реакций или их соотношение. Таким способом была измерена константа скорости диссоциации молекулярного хлора [75, 76]. Прямые спектроскопические измерения NO_2 , проведенные в работах [77, 78], позволили определить значение константы скорости распада нитрометана:



которое было подтверждено недавними измерениями [79] и теоретическими расчетами [80]. Полученные в работах [81, 82] посредством простых методик спектроскопической диагностики в широком диапазоне температуры значения константы скорости распада N_2O оказались настолько надежными, что полностью были подтверждены более трудоемкими и дорогостоящими методиками измерений [83, 84]. Используя в дальнейших работах распад N_2O как источник атомов кислорода, авторы работы [85] измерили константу скорости k_1 ключевой реакции воспламенения углеводородов:



Все последующие измерения различными методами величины константы скорости реакции (1) подтвердили точность определенного в [85] значения k_1 [86]. В обзоре [65] были сформулированы основные концепции механизма самовоспламенения и промотирования перспективных топлив. Основываясь на собственных исследованиях и обширных данных из литературы, авторы работы [65] по существу рассматривают важный раздел науки о горении, а именно, моделирование сложного комплекса явлений, происходящих в неизотермически и неадиабатически реагирующей среде. Показано, что на основе математического моделирования можно успешно решать целый ряд научно-технических задач. К ним относятся оптимизация условий горения с целью минимизации эмиссии экологически вредных веществ, развитие условий экономически выгодного превращения топлива в продукты горения и повышение КПД. Представленная в работе [65] методология позволяет не только исследовать кинетику химических реакций, но и определять их роль в изучении и прогнозировании процессов горения различных перспективных топлив. Развитые на основе этой методологии подходы позволили определить вклады тепловыделения от различных элементарных реакций в общую скорость тепловыделения в процессе распространения пламени водородно-воздушных смесей [87].

В работе [88] проведено изучение малых добавок пропилена и изопропилового спирта на скорость распространения пламени водородно-воздушных смесей в преддетонационном режиме, на переход дефлаграции в детонацию и на интенсивность горения. Показано, что различие эффективности воздействия этих присадок на горение определяется, прежде всего, их способностью обрывать реакционные цепи. Расщепление присадок в пламени H_2 происходит практически только в результате их реакций с активными промежуточными продуктами горения водорода, в которых эти частицы заменяются малоактивными радикалами. В работе [89] было экспериментально изучено промотирующее влияние малой добавки гексакарбонила молибдена на самовоспламенение водородно-воздушной смеси. Было показано, что при температурах ниже 1000 К атомы молибдена, образующиеся при быстром термическом распаде $\text{Mo}(\text{CO})_6$, взаимодействуя с O_2 с образованием атомов кислорода, заметно сокращают период наблюдаемой задержки воспламенения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Многолетние работы коллектива под руководством профессора А.А. Борисова и его ближайших коллег показали, что на основе научно обоснованных экспериментов, дополненных матема-

тическим моделированием, можно успешно решать целый ряд фундаментальных и научно-технических задач. В частности показано, что в существующих теоретических моделях пределов распространения детонации независимость концентраций на пределе от диаметра трубы не подтверждена, поэтому необходимо их дополнение. На основе проведенных экспериментов и анализа сделан вывод, по крайней мере для ограниченного диапазона изменения энергии инициирования и диаметра трубы, что можно говорить о пределах детонации как о характеристике только смеси. Установлено также, что пределу всегда предшествует область неустойчивых режимов с пульсирующей скоростью.

К этим исследованиям тесно примыкают сформулированные под руководством А.А. Борисова, на основе собственных исследований и обширных данных из литературы, основные концепции механизма самовоспламенения и промотирования различных топлив. По существу рассмотрен важный раздел науки о горении, а именно моделирование сложного комплекса явлений, происходящих в неизотермически и неадиабатически реагирующей среде.

Большое значение имеет полученное под руководством профессора А.А. Борисова экспериментальное подтверждение очагового характера воспламенения углеводородов в условиях низких температур в статических установках. В работах профессора А.А. Борисова с коллегами математическое моделирование параметров волн давления занимает большое место. Математическое моделирование проводилось в основном для систем “воздух–газ”, “воздух–конденсированная взвесь”, “воздух–пыль, включая твердые распылы окислителя”. Была обоснована коррекция расчета тротилового эквивалента с помощью предложенных параметрических соотношений для оценки параметров волн давления как в фазе сжатия, так и в фазе разрежения.

Неоспорим вклад А.А. Борисова и его коллег в исследование вопроса о влиянии реакций, происходящих за фронтом низкоскоростной детонации, на ее устойчивость. На основе проведенных исследований предложена теоретическая стационарная модель двухфронтной детонации, хорошо согласующаяся с экспериментом.

Авторы выражают благодарность С.В. Хомику за помощь в подготовке статьи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Борисов А.А.* Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. М.: ИХФ АН СССР, 1970.
2. *Борисов А.А., Когарко С.М., Любимов А.В.* // ЖПМТФ. 1960. № 3. С. 175.
3. *Борисов А.А., Заслонко И.С., Когарко С.М.* // ЖПМТФ. 1964. № 6. 104.
4. *Борисов А.А., Гельфанд Б.Е., Лобань С.А., Маилков А.Е., Хомик С.В.* // Хим. физика. 1982. Т. 1. № 6. С. 848.
5. *Борисов А.А., Михалкин В.Н., Хомик С.В.* Устройство для определения высоты щели, предельной для распространения газовой детонации: А.с. 1496469. СССР // Заявка от 02.11.1987. Зарегистрировано в госреестре изобретений 22.03.1989.
6. *Хомик С.В., Медведев С.П., Борисов А.А. и др.* // Хим. физика. 2016. Т. 35. № 4. С. 48.
7. *Борисов А.А., Михалкин В.Н., Хомик С.В.* Способ определения параметров конического переходника для передачи детонации: А.с. 1403793. СССР // Заявка от 27.05.1986. Зарегистрировано в госреестре изобретений 15.02.1988.
8. *Борисов А.А., Михалкин В.Н., Хомик С.В.* Устройство для определения критического диаметра распространения газовой детонации в свободном цилиндрическом заряде: А.с. 1396765. СССР // Заявка от 05.06.1986. Зарегистрировано в госреестре изобретений 15.01.1988.
9. *Борисов А.А., Михалкин В.Н., Хомик С.В.* // Докл. АН СССР. 1987. Т. 296. № 1. С. 88.
10. *Борисов А.А., Михалкин В.Н., Хомик С.В.* Способ оценки критического для распространения газовой детонации диаметра свободного цилиндрического заряда: А.с. 1522916. СССР // Заявка от 02.11.1987. Зарегистрировано в госреестре изобретений 15.07.1989.
11. *Борисов А.А., Михалкин В.Н., Хомик С.В.* // Хим. физика. 1989. Т. 8. № 6. С. 798.
12. *Borisov A.A., Khomik S.V., Mikhalkin V.N.* // Progress in Astronautics and Aeronautics. Dynamics of Detonations and Explosions: Detonations. V. 133. Washington, SW: AIAA, 1991. P. 118.
13. *Borisov A.A., Khomik S.V., Mikhalkin V.N., Saneev E.V.* // Progress in Astronautics and Aeronautics. Dynamics of Detonations and Explosions: Detonations. V. 133. Washington, SW: AIAA, 1991. P. 142.
14. *Borisov A.A.* // Gaseous and Heterogeneous Detonations: Science to Applications / Eds. Roy G.D., Frolov S.M., Kailasanath K., Smirnov N.N. Moscow: ENAS Publishers, 1999. P. 3.
15. *Кузнецов Н.М.* // ЖЭТФ. 1967. Т.52. Вып.1. С. 309.
16. *Khasainov B.A., Ermolaev B.S., Borisov A.A., Korotkov A.I.* // Acta Astronautica. 1979. V. 6. P. 557.
17. *Veyssiere B.* // Progress in Astronautics and Aeronautics. Dynamics of Explosions. V. 106. N.Y.: AIAA, 1986. P. 522.
18. *Khasainov B.A., Veyssiere B.* // Arch. Combust. 1987. V. 7. № 3/4. P. 333.
19. *Khasainov B.A., Veyssiere B., Ingnoli W.* // High-speed Deflagration and Detonation. Fundamentals and Control / Eds. Roy G., Frolov S., Netzer D., Borisov A. Russia. Moscow: ELEX-KM Publishers, 2001. P. 163.
20. *Desbordes D., Presles H.N.* // Shock Wave Science and Technology Reference Library // Ed. Zhang F. 2012. V. 6. P. 281.

21. *Khasainov B., Virof F., Presles H.-N., Desbordes D.* // Shock Waves. 2013. V. 23. P. 213.
22. *Борисов А.А., Хасаинов Б.А., Вейссьер Б. и др.* // Хим. физика. 1991. Т. 10. № 1. С. 369.
23. *Veysiere B., Khasainov B., Briand A.* // Shock Waves. 2008. V. 18. P. 307.
24. *Briand A., Veysiere B., Khasainov B.* // Shock Waves 2010. V. 20. P. 521.
25. *Khasainov B., Virof F., Veysiere B.* // Shock Waves. 2013. V. 23. P. 271.
26. *Khasainov B.A., Borisov A.A., Ermolaev B.S., Korotkov A.I.* // Proc. Sympos. (Intern.) on Detonation / Ed. Short J.M. V. 7. Annapolis, MD: NSWC, 1981. P. 435.
27. *Хасаинов Б.А., Аттетков А.В., Борисов А.А.* // Хим. физика. 1996. Т. 15. № 7. С. 53.
28. *Khasainov B.A., Ermolaev B.S., Presles H.-N., Vidal P.* // Shock Waves. 1997. V. 7. P. 89.
29. *Фролов С.М., Барыкин А.Е., Борисов А.А.* // Хим. физика. 2004. Т. 23. № 3. С. 17.
30. *Фролов С.М., Аксенов В.С., Гусев П.А. и др.* // ДАН. 2014. Т. 459. № 6. С. 711.
31. *Фролов С.М., Иванов В.С., Шамишин И.О. и др.* // ДАН. 2020. Т. 490. С. 82.
32. *Фролов С.М., Иванов В.С.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 4. С. 68.
33. *Садовский М.А.* // Физика взрыва. Сб. № 1 научно-исследовательских работ в области физики взрыва. М.: Изд-во АН СССР, 1952. С. 20.
34. *Сумской С.И., Софьин А.С., Зайнетдинов С.Х., Агапов А.А.* // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 8. С. 28.
35. *Агапов А.А., Сафонов В.С., Сумской С.И., Швыряев А.А.* // Безопасность труда в пром-ти. 2020. № 5. С. 36.
36. *Борисов А.А., Гельфанд Б.Е., Цыганов С.А.* // Физика горения и взрыва. 1985. Т. 21. № 2. С. 90.
37. *Гельфанд Б.Е., Борисов А.А., Цыганов С.А.* // Физика горения и взрыва. 1989. Т. 25. № 1. С. 136.
38. *Козарко С.М., Адушкин В.В., Лямин А.Г.* // Научн.-техн. пробл. горения и взрыва. 1965. № 2. С. 22.
39. *Адушкин В.В., Гостинцев Ю.А., Фортвов В.Е.* Энергетические характеристики взрыва и параметры ударных волн в воздухе при детонации водородо-содержащих облаков в свободной атмосфере. Препринт. Черногоровка: ИХФЧ РАН, 1995.
40. *Агапов А.А., Софьин А.С., Сумской С.И.* // Безопасность труда в пром-ти. 2020. № 4. С. 27.
41. *Борисов А.А., Касимов А.Р., Косенков В.В. и др.* // Хим. физика. 1996. Т. 15. № 4. С. 126.
42. *Борисов А.А., Гельфанд Б.Е., Губин С.А., Сумской С.И., Шаргатов В.А.* // Физика горения и взрыва. 1988. Т. 24. № 2. С. 124.
43. *Борисов А.А., Гельфанд Б.Е., Губин С.А., Одинцов В.В., Шаргатов В.А.* // Хим. физика. 1986. Т. 3. № 5. С. 435.
44. *Борисов А.А., Сумской С.И., Шамишин И.О.* // Хим. физика. 2003. Т. 22. № 3. С. 61.
45. *Борисов А.А., Комиссаров П.В., Соколов Г.Н., Каплюков Г.В.* // Горение и взрыв / Под ред. Фролова С.М. Вып. 3. М.: Торус Пресс, 2010. С. 161.
46. *Борисов А.А., Сулимов А.А., Ермолаев Б.С. и др.* // Горение и взрыв / Под ред. Фролова С.М. Вып. 2. М.: Торус Пресс, 2009. С. 78.
47. *Комиссаров П.В., Борисов А.А., Хасаинов Б.А., Ермолаев Б.С., Сулимов А.А.* // Горение и взрыв. 2018. Т. 11. № 2. С. 126.
48. *Шамишин И.О.* Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М.: НИЯУ МИФИ, 2003.
49. *Борисов А.А., Сумской С.И., Шамишин И.О. и др.* // Хим. физика. 2002. Т. 21. № 5. С. 97.
50. *Шамишин И.О.* // Горение и взрыв / Под ред. Фролова С.М. Вып. 3. М.: Торус Пресс, 2010. С. 169.
51. *Борисов А.А., Сулимов А.А., Сукоян М.К. и др.* // Хим. физика. 2009. Т. 28. № 11. С. 59.
52. *Борисов А.А., Комиссаров П.В., Сумской С.И. и др.* // Хим. физика. 2003. Т. 22. № 12. С. 48.
53. *Борисов А.А., Сумской С.И., Комиссаров П.В.* // Хим. физика. 2002. Т. 21. № 11. С. 52.
54. *Борисов А.А., Маилков А.Е., Сумской С.И. и др.* // Хим. физика. 2003. Т. 22. № 6. С. 87.
55. *Borisov A.A., Sumskoj S.I., Maikov A.E. et al.* // Application of Detonation to Propulsion. ICPCD-2004. Moscow: Torus Press Ltd., 2004. P. 287.
56. *Борисов А.А., Маилков А.Е., Сумской С.И. и др.* // Хим. физика. 2003. Т. 22. № 8. С. 68.
57. *Маилков А.Е., Силакова М.А., Барыкин А.Е. и др.* // Хим. физика. 2005. Т. 24. № 2. С. 68.
58. *Борисов А.А., Заманский В.М., Лисянский В.В., Скачков Г.И., Трошин К.Я.* // Хим. физика. 1986. Т. 5. № 12. С. 1683.
59. *Борисов А.А., Заманский В.М., Лисянский В.В., Скачков Г.И., Трошин К.Я.* // Хим. физика. 1987. Т. 6. № 1. С. 101.
60. *Борисов А.А., Заманский В.М., Лисянский В.В., Скачков Г.И., Трошин К.Я.* // Хим. физика. 1989. Т. 8. № 12. С. 1640.
61. *Борисов А.А., Заманский В.М., Лисянский В.В., Трошин К.Я.* // Хим. физика. 1992. Т. 11. № 9. С. 1235.
62. *Борисов А.А., Скачков Г.И., Трошин К.Я., Заманский В.М.* // Хим. физика. 1996. Т. 15. № 8. С. 54.
63. *Borusov A.A., Lisyanski V.V., Skachkov G.I., Troshin K.Ya., Zamanski V.M.* // Proc. Sympos. Combust. 1989. V. 22. P. 903.
64. *Borisov A.A. Skachkov G.I. Troshin. K.Ya.* // Intern. Colloquium Advanced Computation Analysis Combustion. ENAS. Moscow: Torus Press Ltd., 1997. P. 79.
65. *Заманский В.М., Борисов А.А.* // Итоги науки и техники. Кинетика и катализ. Т. 19. М.: ВИНТИ, 1989. С. 156.
66. *Борисов А.А., Скачков Г.И., Трошин К.Я.* // Хим. физика. 1999. Т. 18. № 9. С. 45.
67. *Борисов А.А., Заманский В.М., Лисянский В.В. и др.* // Хим. физика. 1988. Т. 7. № 5. С. 665.
68. *Borisov A.A., Mel'nichuk O.I., Kasimov A.R. et al.* // J. de Phys. IV Colloque C4 supplement au J. Physique III. 1995. V. 5. P. C4-129.
69. *Борисов А.А., Рубцов Н.М., Скачков Г.И., Трошин К.Я.* // Горение и взрыв / Под ред. Фролова С.М. Вып. 4. М.: Торус Пресс, 2011. № 1. С. 4.

70. Борисов А.А., Рубцов Н.М., Скачков Г.И., Трошин К.Я. // Хим. физика. 2012. Т. 31. № 8. С. 30.
71. Борисов А.А., Сметанюк В.А., Трошин К.Я., Шамшин И.О. // Горение и взрыв. 2016. Т. 9. № 1. С. 4.
72. Трошин К.Я., Шамшин И.О., Сметанюк В.А., Борисов А.А. // Хим. физика. 2017. Т. 36. № 11. С. 49.
73. Систер В.Г., Борисов А.А., Трошин К.Я. и др. // Хим. физика. 2006. Т. 25. № 1. С. 61.
74. Билера И.В., Борисов А.А., Борунова А.Б. и др. // Нефтехимия. 2010. Т. 50. № 5. С. 351.
75. Борисов А.А., Когарко С.М., Скачков Г.И. // Научн.-тех. пробл. гор. взрыва. 1965. № 1. С. 15.
76. Борисов А.А., Когарко С.М., Скачков Г.И. // Физика горения и взрыва. 1965. Т. 3. С. 10.
77. Борисов А.А., Когарко С.М., Скачков Г.И. // Кинетика и катализ. 1966. Т. 7. Вып. 4. С. 589.
78. Борисов А.А., Заслонко И.С., Когарко С.М. // Физика горения и взрыва. 1968. № 3. С. 387.
79. Кузнецов Н.М., Петров Ю.П., Турецкий С.В. // Кинетика и катализ. 2012. V. 53. P. 3.
80. Zhu R.S., Raghunath P., Lin M.C. // J. Phys. Chem. A. 2013. V. 117. P. 7308.
81. Борисов А.А. // Кинетика и катализ. 1968. Т. 9. С. 482.
82. Борисов А.А., Скачков Г.И. // Кинетика и катализ. 1972. Т. 13. № 1. С. 42.
83. Rohrig M., Petersen E.L., Davidson D.F., Hanson R.K. // Intern. J. Chem. Kinet. 1996. V. 28. P. 599.
84. Javoy S., Mevel R., Paillard C.E. // Intern. J. Chem. Kinet. 2009. V. 41. P. 357.
85. Борисов А.А., Драгалова Е.В., Заманский В.М., Лилянский В.В., Скачков Г.И. // Кинетика и катализ. 1981. Т. 22. № 2. С. 305.
86. Тереза А.М., Андержанов Э.К. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 8. С. 58.
87. Азатян В.В., Андрианова З.С., Борисов А.А., Иванова А.Н. // Кинетика и катализ. 2012. Т. 53. № 6. С. 683.
88. Азатян В.В., Борисов А.А., Мержанов А.Г. и др. // Физика горения и взрыва. 2005. Т. 41. № 1. С. 3.
89. Власов П.А., Смирнов В.Н., Тереза А.М. // Хим. физика. 2016. Т. 35. № 6. С. 35.

**ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ**

УДК 541.124

**ИССЛЕДОВАНИЕ РАДИАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ГАЗОВ, ПРОВЕДЕННОЕ
В УДАРНЫХ ТРУБАХ****© 2022 г. Г. Я. Герасимов¹, П. В. Козлов¹, И. Е. Забелинский¹,
Н. Г. Быкова¹, В. Ю. Левашов^{1*}**¹*Институт механики Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия***E-mail: vyl69@mail.ru, levashovvy@imec.msu.ru*

Поступила в редакцию 11.01.2022;

после доработки 16.02.2022;

принята в печать 21.02.2022

Рассмотрено современное состояние исследований в ударных трубах по измерению излучения высокотемпературных газов, моделирующих условия входа космических аппаратов в атмосферу Земли и других планет Солнечной системы. Сделан критический обзор различных типов эксплуатируемых ударных установок, отмечены их достоинства и недостатки. Приведено описание измерительной аппаратуры и методик диагностики получаемой спектроскопической информации. Проанализированы многочисленные экспериментальные данные по излучению ударно-нагретого воздуха вдоль траектории движения спускаемого космического аппарата в атмосфере Земли. Рассмотрены также излучательные характеристики ударно-нагретых газовых смесей, моделирующих состав атмосфер Марса, Венеры, Титана и планет-гигантов.

Ключевые слова: ударные волны, детонационная ударная труба, вторая космическая скорость, радиационный теплообмен, спектр излучения ударно-нагретых газов, высокотемпературные газы.

DOI: 10.31857/S0207401X22080027**ВВЕДЕНИЕ**

Прогресс в освоении космического пространства и создание надежных систем тепловой защиты для вновь создаваемых космических аппаратов (КА) приводят к необходимости более точного решения задач тепломассопереноса у поверхности спускаемого аппарата [1]. Известно, что до сих пор надежность оценок теплового потока к поверхности КА в неравновесных условиях остается очень низкой [2, 3]. С другой стороны, радиационная составляющая теплового потока с увеличением скорости набегающего потока и размеров спускаемого аппарата нарастает значительно быстрее конвективной составляющей и, начиная со скоростей порядка второй космической скорости, становится преобладающей [4, 5]. Все это стимулирует дальнейшие экспериментальные исследования по определению потоков излучения за фронтом сильной ударной волны в широком диапазоне спектра излучения при низких начальных давлениях и высоких скоростях ударной волны.

Одним из основных источников экспериментальных данных по излучению ударно-нагретых газов являются результаты численной обработки экспериментов, выполненных в ударных трубах [6, 7]. Эти данные используются не только для

оценки тепловых потоков к поверхности спускаемых КА, но и для верификации газодинамических моделей обтекания КА в атмосфере Земли и других планет [8–10]. В настоящее время в мировой практике эксплуатируется большое количество ударных труб, отличающихся друг от друга размерами, конструкцией и целью проводимых исследований. Ввод в эксплуатацию новых ударных установок и усовершенствование измерительной аппаратуры позволяют значительно расширить диапазон исследуемых параметров радиационного процесса и получать более точную и детальную информацию по сравнению с большим массивом имеющихся экспериментальных данных [11–13].

Достаточно полное описание действующих ударных установок для измерения радиационных характеристик высокотемпературных газов приведено в обзорах [14–16]. В них обсуждаются конструктивные особенности и характеристики, а также возможности и ограничения различных установок. В настоящем обзоре основное внимание уделяется анализу экспериментальных результатов по излучению ударно-нагретого газа, которые получены на различных ударных установках.

ТИПЫ УДАРНЫХ УСТАНОВОК

В зависимости от исследуемых явлений или процессов условия, реализуемые в гиперзвуковых потоках, могут быть смоделированы с помощью обычных ударных труб, ударных туннелей и двухдиафрагменных ударных труб (expansion tubes). Эксперименты в обычных ударных трубах достаточно точно воспроизводят физико-химические параметры течения вблизи поверхности спускаемого КА и, как правило, в них исследуются процессы излучения ударно-нагретого газа. Однако из-за влияния низкой плотности расстояние между ударной волной и движущейся за ней контактной поверхностью значительно уменьшается с ростом давления, что затрудняет определение характеристик исследуемого газа [17]. Тем не менее этот недостаток компенсируется за счет применения малоинерционных датчиков, оптических средств измерения, высокоскоростного регистрирующего оборудования и эффективных алгоритмов обработки экспериментальных данных.

Ударные туннели являются разновидностью ударных труб, у которых на конце добавлено сопло [18]. На выходе из расширяющейся части сопла течение газа становится гиперзвуковым, что является основой для моделирования обтекания тел применительно к реальным условиям полета. В подобных установках скорость ударной волны обычно порядка орбитальной и ниже [16]. В двухдиафрагменных ударных трубах камера низкого давления (КНД) соединена с дополнительной трубой того же внутреннего диаметра (ускорительной трубой), которая отделена от КНД слабой диафрагмой и откачивается до очень низкого давления. После разрыва вторичной диафрагмы происходит нестационарное расширение тестируемого газа, что увеличивает его общую энтальпию потока и давление. Однако этот тип труб имеет недостаток, заключающийся в том, что время измерений значительно сокращается, а в результирующем потоке газа возникают большие пограничные слои [19].

Ударные установки могут быть трех типов в соответствии с тремя типичными режимами потока, характеризующимися низкой (менее 2 МДж/кг), высокой (2–30 МДж/кг) и очень высокой (выше 30 МДж/кг) удельной энтальпией торможения, что соответствует суборбитальным, орбитальным и суперорбитальным скоростям движения КА в атмосфере Земли [16]. Каждый тип имеет свои преимущества и недостатки, касающиеся производительности, качества воспроизводимого потока, времени измерения и т.д. Более удобным является подразделение ударных установок по способу нагрева толкающего газа в камере высокого давления (КВД). В электродуговых ударных трубах толкающий газ в КВД нагревается до

очень высоких температур (около 20000 К для гелия) за счет импульсного электродугового разряда [20]. Вторым способом нагрева толкающего газа является его адиабатическое сжатие с помощью тяжелого свободного поршня [15]. В качестве толкающего газа обычно используется гелий, который иногда смешивается с небольшим количеством аргона. Третий способ инициирования сильных ударных волн заключается в добавлении некоторого количества водородно-кислородной смеси в толкающий газ, что позволяет использовать детонационное горение для резкого повышения давления в КВД [21].

К первому типу ударных труб, в которых нагрев толкающего газа осуществляется с помощью электродугового разряда, относится хорошо известная установка EAST (Electric Arc Shock Tube) с диаметром КНД 10.16 см, эксплуатируемая в Исследовательском центре NASA Ames [22]. При работе в режиме ударного туннеля с отраженной ударной волной установка способна моделировать газовую среду при очень высоких энтальпиях, причем скорость ударной волны может превышать 18 км/с [15]. На установке проведено большое количество измерений спектров излучения ударно-нагретых газов применительно к условиям входа КА в атмосферу Земли и других планет с орбитальными и сверхорбитальными скоростями [23–25].

В Исследовательском центре CUBRC (Buffalo, USA) функционируют четыре ударных туннеля LENS (Large Energy National Shock Tube) с электрически нагреваемой КВД [26]. В ударных туннелях изучается обтекание тел различной конфигурации, а также измеряются спектры излучения ударно-нагретых газов. С вводом в эксплуатацию нового крупномасштабного туннеля LENS XX [27] Исследовательский центр CUBRC получил возможность проводить испытания в любом сверхзвуковом или гиперзвуковом режиме, представляющем практический интерес. Эта ударная установка может генерировать гиперзвуковые потоки с удельной энтальпией торможения более 120 МДж/кг и скоростью ударной волны выше 17 км/с [28]. Аналогичная отечественная установка ADST (Arc Driven Shock Tube), длительное время эксплуатируемая в ЦАГИ, позволяет исследовать радиационные и ионизационные характеристики различных высокотемпературных газовых смесей при скоростях ударной волны до 10 км/с [29–31].

Принцип действия второго типа ударных установок основан на использовании тяжелого свободного поршня для адиабатического сжатия толкающего газа до давлений от десятков до нескольких сотен МПа [15]. В настоящее время поршневые ударные установки широко используются по всему миру для изучения процессов,

протекающих в высокотемпературной газовой среде за ударной волной. К ним в первую очередь относится серия ударных туннелей X1, X2 и X3 Университета Квинсленда (Австралия), которые в расширительном режиме способны генерировать ударную волну, имеющую скорость до 11 км/с [32]. Японское агентство аэрокосмических исследований (JAXA) эксплуатирует в настоящее время ударную трубу HVST (Hyper Velocity Shock Tube) с двойной диафрагмой и свободным поршнем, исследуя термохимические неравновесные явления и, в частности, излучение, испускаемое из сильно нагретой области за ударной волной [33].

Недавно введенная в эксплуатацию поршневая ударная установка T6 Stalker является результатом совместной работы Оксфордского университета и Центра гиперзвуковых исследований Университета Квинсленда [34]. Установка может работать в режиме туннеля с отраженной ударной волной для тестирования моделей спускаемых КА, а также в режиме двухдиафрагменной ударной трубы для исследования излучения ударно-нагретого газа. По размерам эта установка аналогична установкам EAST и X2, но способна генерировать намного более высокие скорости ударной волны [35]. Самой большой в мире поршневой ударной установкой является высокоэнthalпийный ударный туннель FD-21FPST, недавно построенный в Китайской академии аэрокосмической аэродинамики (CAAA) и имеющий диаметр тестового участка 2 м и общую длину 170 м [36].

Третий способ инициирования сильных ударных волн заключается в добавлении некоторого количества водородно-кислородной смеси в толкающий газ, что позволяет использовать детонационное горение для резкого повышения давления в КВД. В настоящее время эксплуатируемые ударные установки подобного типа включают ударный туннель NASA HYPULSE (ATK GASL, USA) [37, 38], ударный туннель TH2 (Aachen, Germany) [39], а также ударные установки JF16 [40] и JFX [41], функционирующие в Китае. В настоящее время в Высшем техническом институте (IST, Lisbon) при финансовой поддержке Европейского космического агентства (ESA) введена в эксплуатацию новая кинетическая ударная труба ESTHER (European Shock Tube for High Enthalpy Research), способная генерировать ударные волны со скоростями до 18 км/с [42]. Среди отечественных установок наибольший объем информации по измерению радиационных характеристик ударно-нагретых газов получен в ударных трубах МФТИ [43, 44] и НИИ механики МГУ [45–47].

Ударные установки на основе детонационного горения намного дешевле поршневых и электроразрядных, так как не нуждаются в каких-либо сложных механических и электроразрядных устройствах и, соответственно, требуют гораздо

меньшего опыта эксплуатации [16]. С другой стороны, на них не удается получить скорость ударной волны выше 7–8 км/с. Эта проблема была решена с использованием модернизированной двухдиафрагменной ударной трубы DDST-M [48], работающей в НИИ механики МГУ, где за счет оптимизации детонационного процесса в КВД удалось достичь скорости ударной волны в воздухе, равной 11.4 км/с, при начальном давлении газа перед ударной волной $p_0 = 0.25$ Торр.

Изучение радиационных характеристик ударно-нагретых газов вблизи поверхности КА проводится на различных ударных установках. На рис. 1 представлено сравнение параметров ударного процесса, реализуемых на некоторых из них, которые моделируют условия входа космических аппаратов в атмосферу Земли с орбитальными и сверхорбитальными скоростями [49]. Данные приведены в координатах (V_{SW}, p_0) , где V_{SW} – скорость ударной волны. Как правило, экспериментальные точки на подобных диаграммах группируются вблизи траекторий спуска КА. Наиболее широкими возможностями моделирования условий, возникающих при возвращении КА, располагает электроразрядный ударный тоннель EAST [50]. Экспериментальные условия, реализуемые на поршневой ударной установке T6 [51], располагаются вдоль траектории КА, возвращаемого с Луны. Близкие условия получены в ударных трубах HVST [52] и ADST [30]. Ударная труба DDST-M имеет более скромные возможности, чем электроразрядные и поршневые установки, но способна обеспечить исследования по излучению ударно-нагретого газа в условиях, характерных для входа КА в атмосферу Земли со сверхорбитальной скоростью [48].

СИСТЕМЫ РЕГИСТРАЦИИ ИЗЛУЧЕНИЯ

Системы регистрации излучения в ударных установках позволяют фиксировать как интегральное излучение (панорамный спектр) ударно-нагретого газа, проходящего мимо измерительного сечения, так и эволюцию излучения во времени в узком интервале спектра с высоким временным и спектральным разрешением. В качестве примера можно рассмотреть систему регистрации излучения установки DDST-M [53], которая показана на рис. 2. Система состоит из двух измерительных секций и позволяет измерять временное и спектральное распределение излучения газа в ультрафиолетовом (UV) и видимом (Vis) диапазонах. Основная измерительная секция, собранная на базе спектрографов V&M50 и Horiba 1061, регистрирует временную эволюцию излучения на определенных длинах волн в одном и том же измерительном сечении. Спектрограф V&M50 вместо регистрации временной эволюции излучения может фиксировать интегральные по вре-

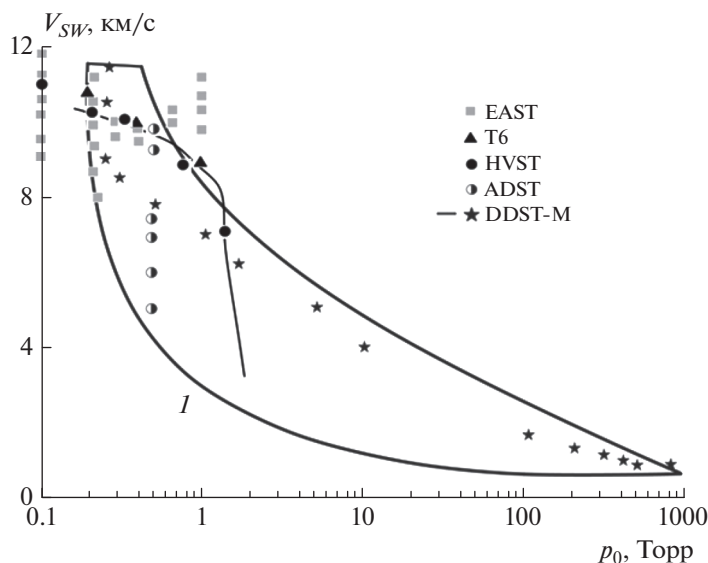


Рис. 1. Экспериментальные условия, реализуемые в различных ударных установках, на фоне траектории возвращения КА с Луны (кривая 1) [49].

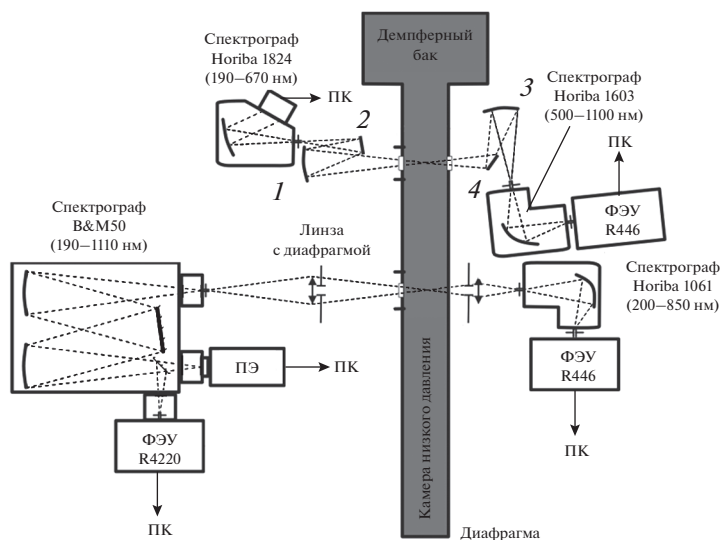


Рис. 2. Система регистрации излучения на установке DDST-M [53]: 1, 2, 3, 4 – зеркала, ФЭУ – фотоэлектронный умножитель, ПК – персональный компьютер, ПЭ – прибор с зарядовой связью с электрооптическим преобразователем.

мени спектры излучения ICCD-камерой в одном из спектральных поддиапазонов: 200–420 нм, 405–635 нм и 625–850 нм. Вспомогательная измерительная секция, собранная на базе спектрографов Horiba 1824 и Horiba 1603, фиксирует интегральную по времени плотность излучения в спектральных UV- и Vis-диапазонах соответственно. Система регистрации с использованием четырех спектрографов с различным спектральным разрешением и возможностью проводить измерения эволюции излучения во времени делает

ее способной быстро подстраиваться для решения различных задач [54].

Система регистрации излучения установки EAST позволяет измерять временное и спектральное распределение излучения газа в широком интервале спектра от вакуумного ультрафиолета ($\lambda = 120\text{--}200$ нм) до средневолнового инфракрасного излучения ($\lambda = 1600\text{--}5500$ нм) [55]. Для каждой из исследуемых областей спектра предъявляются различные требования с точки зрения детекторов и приборов. В частности, мощность излучения из области вакуумного ультрафиолета

(VUV) при высоких скоростях ударных волн оказывается выше, чем из видимой области спектра [23]. В то же время составляющая лучистого теплового потока из VUV-области спектра является наименее изученной [56]. Это связано с тем, что VUV-излучение интенсивно поглощается окружающим кислородом. Следовательно, для получения соответствующих экспериментальных данных необходимо использовать спектрометрическую аппаратуру с предварительной вакуумной откачкой всего внутреннего объема спектрометра и всего тракта вывода излучения от окна наблюдения до устройства регистрации.

Для получения значений интенсивности излучения в абсолютных единицах ($\text{Вт}/\text{см}^2 \cdot \text{мкм} \cdot \text{ср}$) проводится предварительная калибровка регистрирующей системы. Процедура калибровки состоит в сравнении измеренных значений сигналов с излучением известных калибровочных источников. В качестве таких источников для регистрирующей системы установки DDST-M использовалась дейтериевая лампа Hamamatsu для UV-диапазона и вольфрамовая лампа накаливания SI-10 для VIS-диапазона [48]. Лампа обычно помещается в измерительную секцию по оси трубы, что позволяет откалибровать весь оптический путь на месте, тем самым учитывая все системные потери [57]. Для лучшего сравнения результатов измерений, полученных на разных установках, в абсолютных значениях интенсивности излучения необходимо учитывать диаметр ударной трубы. Поэтому в окончательном виде экспериментальные результаты представляются в виде спектральной плотности энергии излучения, B_λ , в единицах $\text{Вт}/\text{см}^3 \cdot \text{мкм} \cdot \text{ср}$ или суммарной плотности излучения J в единицах $\text{Вт}/\text{см}^3 \cdot \text{ср}$.

ИЗЛУЧЕНИЕ УДАРНО-НАГРЕТОГО ВОЗДУХА

Многочисленные эксперименты, проведенные в ударных трубах, позволили получить данные по излучению ударно-нагретого воздуха вдоль траектории движения спускаемого КА в атмосфере Земли [7, 23, 46–49, 54–63]. Основной объем спектроскопической информации дают интегральные по времени развертки излучения (панорамные спектры) в интервале длин волн $\lambda = 120\text{--}1100$ нм. Анализ панорамных спектров позволяет выделить основные закономерности излучения высокотемпературного газа на различных участках траектории спуска КА в зависимости от скорости ударной волны и начального давления газа.

На рис. 3 представлен панорамный спектр излучения воздуха, полученный в ударной трубе DDST-M за падающей ударной волной в VUV-диапазоне длин волн [47]. Видно, что в излучении ударно-нагретого воздуха из области вакуумного

ультрафиолета присутствует одна резонансная линия атома кислорода на длине волны 130 нм, несколько линий атома азота, а именно, мультиплеты при $\lambda = 120, 141, 149$ и 174 нм, а также три линии атома углерода $\lambda = 156, 166$ и 193 нм. Присутствие в спектре воздушной смеси линий углерода может быть объяснено диффузией этого элемента со стенок ударной трубы. Кроме того, в исследуемом спектре присутствуют структуры, характерные для излучения двухатомных молекул. В частности, излучение в диапазоне длин волн 150–230 нм с максимумом в окрестности $\lambda = 190$ нм принадлежит молекуле NO. Интегрирование B_λ по длине волны позволяет оценить вклад отдельных спектральных интервалов в общую интенсивность излучения. В рассматриваемом случае величина измеренного интегрального излучения в окрестности $\lambda = 120$ нм в несколько раз превышает величину излучения в диапазоне длин волн $\lambda = 130\text{--}220$ нм, что характерно для VUV-области.

Панорамный спектр излучения воздуха, полученный в ударной трубе DDST-M в интервале длин волн $\lambda = 190\text{--}1100$ нм, показан на рис. 4 [64]. Данный интервал соответствует ультрафиолетовому, видимому, ближнему инфракрасному (NIR) и инфракрасному (IR) спектральным диапазонам. Анализ спектра показывает, что основной вклад в излучение в UV-диапазоне дают молекулы N_2 во второй положительной системе полос (275–400 нм), молекулы NO в γ -, δ - и ϵ -системах полос (190–300 нм), радикалы CN в фиолетовой системе полос (330–425 нм) и молекулярные ионы N_2^+ в первой отрицательной системе полос (300–500 нм) [65, 66]. Значительный вклад в излучение воздуха в этом спектральном диапазоне вносит система полос Шумана–Рунге молекулярного кислорода, которая описывается электронным переходом $B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ [67]. Излучение молекулярных компонентов смеси обусловлено значительной заселенностью их возбужденных электронных состояний непосредственно за фронтом ударной волны и их малым временем жизни, а также тем фактом, что молекулы и молекулярные ионы не успевают полностью диссоциировать за время наблюдения. Следует отметить, что в рассматриваемых экспериментах интенсивность излучения молекулярных полос $\text{N}_2(2^+)$, $\text{N}_2^+(1^-)$ и $\text{CN}(v)$ значительно увеличивается с повышением скорости ударной волны.

Атомарные линии, изображенные на рис. 4 узкими пиками, описывают излучение атомов N и O. Наиболее интенсивное свечение атомарного азота наблюдается на длинах волн 601, 649, 664, 747, 822, 939, 986 и 1054 нм и атомарного кислорода на длинах волн 557, 777, 822, 845 и 926 нм. Переходы из возбужденных состояний атомов N и O

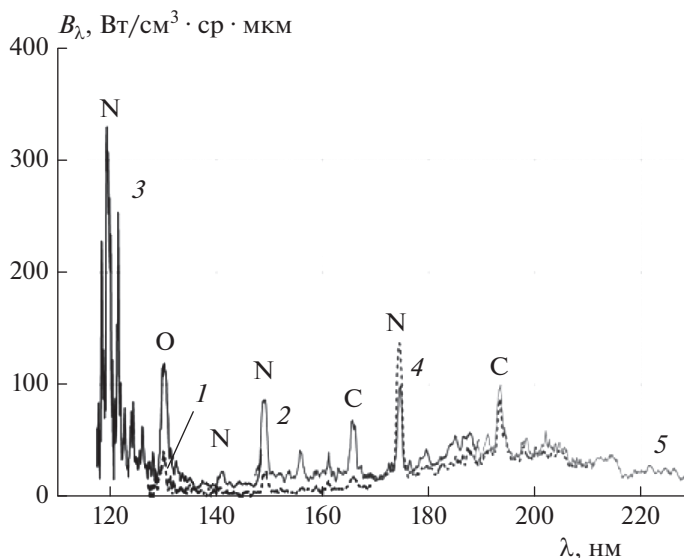


Рис. 3. Спектральная плотность энергии излучения ударной волны (B_λ) в воздухе в VUV-диапазоне при начальном давлении $p_0 = 0.25$ Торр и различных скоростях ударной волны: $V_{SW} = 6.5$ (1), 7.0 (2), 7.2 (3), 8.2 (4) и 8.4 км/с (5) [47].

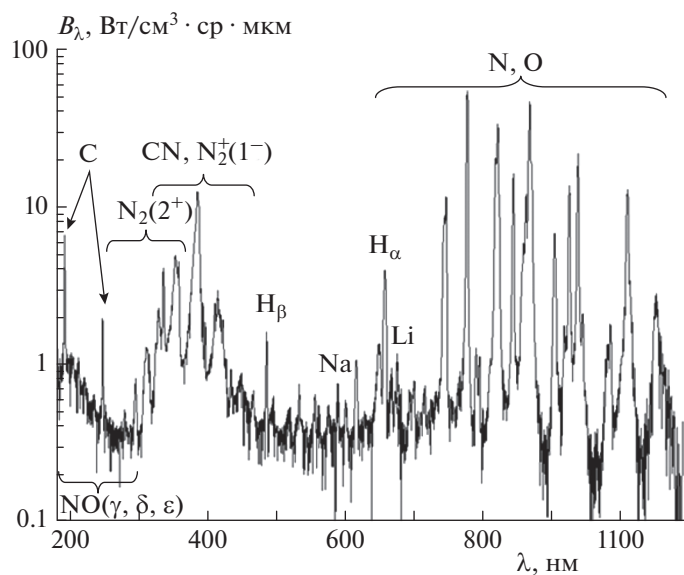


Рис. 4. Интегральная по времени развертка излучения ударно-нагретого воздуха в UV/Vis/IR-диапазоне при $p_0 = 0.25$ Торр и $V_{SW} = 10$ км/с [64].

в основном состоянии являются, как правило, коротковолновыми и лежат в области вакуумного ультрафиолета, как это показано на рис. 3 [47]. В спектрах также идентифицируются атомарные линии углерода (193 и 247 нм) и линии атома водорода H_α и H_β серии Бальмера (656 и 486 нм). Причины появления этих линий, а также молекулярных полос $CN(\nu)$ связаны с присутствием углеродсодержащих примесей и водяных паров в исследуемом газе, которые конденсируются на

стенках ударной трубы в процессе предыдущих экспериментов и довольно сложно поддаются откату. Присутствие в спектре линий Na (589 нм) и Li (671 нм), возможно, связано с люминесценцией кварцевого стекла окон наблюдения под действием сильного излучения из VUV-области.

Большое количество информации по радиационным характеристикам ударно-нагретого воздуха получено на ударной установке EAST [23, 24, 50, 55, 56]. На рис. 5 приведены панорамный и

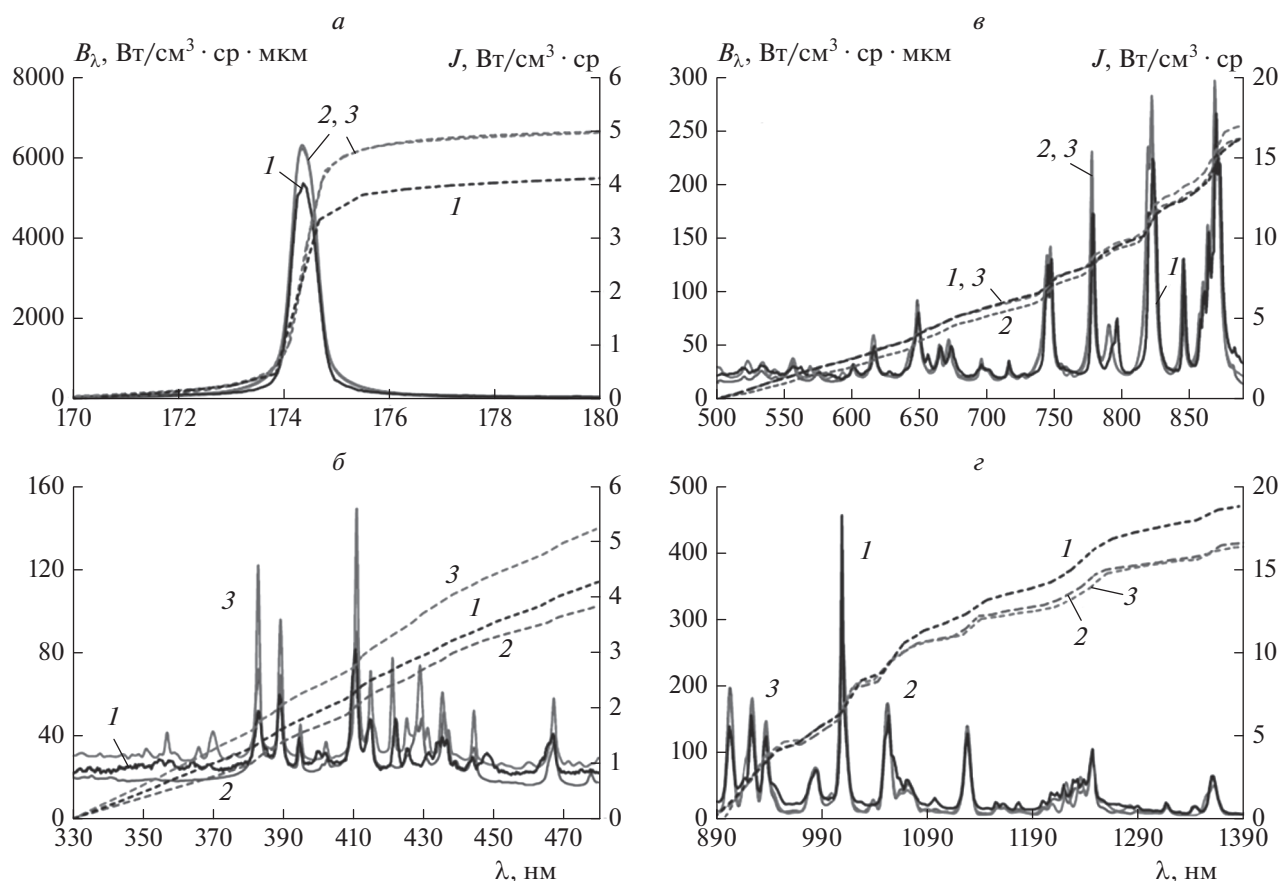


Рис. 5. Спектральная (сплошные линии) и суммарная (штриховые линии) плотность излучения воздуха при $p_0 = 0.2$ Торр и $V_{SW} = 13.64$ км/с в спектральных диапазонах VUV (а), UV/Vis (б), Vis/NIR (в) и IR (г): 1 – экспериментальные данные, полученные на установке EAST, 2 – расчет по программе NEQAIR, 3 – расчет по программе HARA [50].

интегральный спектры излучения воздуха в следующих спектральных диапазонах: VUV (170–180 нм), UV/VIS (330–480 нм), Vis/NIR (500–890 нм) и IR (890–1390 нм), при скорости ударной волны $V_{SW} = 13.64$ км/с и начальном давлении воздуха перед ударной волной $p_0 = 0.2$ Торр [50]. Как уже отмечалось выше, VUV-область спектра (рис. 5а) является очень сложным интервалом волн для получения спектроскопической информации из-за поглощения испускаемого излучения окружающим кислородом. Поэтому, с одной стороны, собирающая оптика и спектрометр должны быть расположены в вакууме, а с другой – требуются специальные окна для пропускания фотонов (диоксид кремния для $\lambda > 165$ нм, сапфир для $\lambda > 145$ нм и LiF или MgF_2 для $\lambda > 120$ нм). В приведенных данных измерения проводились с использованием только окон из кварцевого стекла, поэтому полученная информация ограничивается длинами волн более 165 нм. Основной излучающей линией в этом диапазоне является линия азота с $\lambda = 174$ нм. UV/Vis-область спектра (рис. 5б) является одной из наиболее сложных областей для анализа

из-за наложения молекулярных и атомных эмиссионных линий на преобладающее в этой области фоновое излучение. Поэтому в отличие от VUV-области, где можно анализировать отдельные спектральные линии, спектральный UV-диапазон должен рассматриваться как единое целое, так как очень трудно выделить отдельные излучающие полосы и линии из общего спектра излучения. В Vis/NIR- и IR-диапазонах спектра излучение описывается только атомными линиями, а влияние фонового континуума менее значительно. Как видно из рис. 5в и г, суммарная плотность излучения J в этих спектральных областях является преобладающей по сравнению с VUV- и UV/Vis-областями.

На рис. 5 приводятся также расчетные данные по спектрам излучения в рассматриваемых областях, полученные с помощью компьютерных программ NEQAIR (Nonequilibrium Air Radiation) и HARA (High Temperature Aerothermodynamic Radiation). Компьютерная программа NEQAIR основана на прямом методе (*line-by-line*) вычисления спектральных характеристик высокотем-

пературных газов [68]. В качестве исходных данных используются параметры спектральных линий излучения атомов, молекул и ионов газовой смеси. Программа NEQAIR является одной из основных программ, используемых NASA для прогнозирования радиационного нагрева при движении спускаемых КА в атмосферах различных планет, таких как Земля, Марс, Титан и газовые гиганты [69]. Распределение заселенностей электронных состояний компонентов смеси определяется с помощью квазистационарной модели Парка [70], которая решает набор основных уравнений, описывающих возбуждение электронным ударом, дезактивацию, ионизацию, рекомбинацию и радиационную дезактивацию. Компьютерная программа HARA (High Temperature Aerothermodynamic Radiation) основана на наборе атомарных уровней и линий из баз данных NIST и Opacity Project [71]. Компьютерные программы NEQAIR и HARA имеют много общих черт. К ним, в частности, относятся использование атомных спектроскопических характеристик, полученных из базы данных NIST. Тем не менее есть несколько важных отличий, касающихся включения в рассмотрение тех или иных линий и уровней [50].

Анализ экспериментальных и теоретических данных, приведенных на рис. 5, показывает, что обе компьютерные программы адекватно описывают панорамные спектры, полученные на ударной установке EAST. В целом, различие измеренных и вычисленных спектральных плотностей излучения находится в пределах 20%, 22%, 11% и 14% для спектральных диапазонов VUV, UV/Vis, Vis/NIR и IR соответственно. Следует отметить, что программа HARA предсказывает несколько завышенные пики спектральных линий, соответствующих излучению атомов N и O в первых трех диапазонах. Имеются также ряд линий в интервале от 425 до 431 нм, присутствующих в теоретических оценках, но не столь очевидных для результатов экспериментов с EAST.

Изучение радиационных характеристик ударно-нагретого воздуха вблизи поверхности спускаемого КА проводилось с использованием различных ударных установок. В связи с этим представляется интересным сравнение результатов измерения панорамных спектров излучения, полученных на некоторых из этих установок, между собой. На рис. 6 показаны панорамные спектры, снятые на установках Т6 и EAST в диапазоне 350–850 нм [57]. Данные с установки Т6 были получены с использованием лабораторного воздуха, но в наиболее близких условиях к эталонному тестированию на установке EAST. В диапазоне 350–500 нм (рис. 6а) пиковая интенсивность линий, измеренная на установке Т6, существенно ниже соответствующих значений, полученных на установке EAST. Отчасти это связано с различиями в

оптической глубине и скорости ударной волны. С другой стороны, в диапазоне 550–850 нм (рис. 6б) данные, полученные на обеих установках, практически совпадают за редкими исключениями. Фоновое излучение, наблюдаемое в экспериментах с ударной трубой Т6, ниже измеренного на установке EAST и значительно превышает расчетные значения, полученные с помощью программы NEQAIR. Более высокая, чем ожидалось, величина фонового излучения также наблюдалась на ударной установке Х2, где это объяснялось замедлением ударной волны [72].

Сравнение панорамных спектров, полученных на ударных установках DDST-M и EAST приводится на рис. 7 [48]. Результаты в обоих случаях получены примерно при одинаковых экспериментальных условиях. Видно, что спектральные кривые в общих чертах повторяют друг друга. Данные, полученные на установке DDST-M, лежат несколько выше результатов измерений на установке EAST, что можно объяснить более высоким давлением в экспериментах с DDST-M. Наибольшее различие наблюдается в области спектра 370–420 нм, где большую роль играет излучение, генерируемое радикалом CN, концентрация которого сильно зависит от содержания CO₂ в исследуемом воздухе.

Эксперименты в ударных трубах позволяют измерить временную зависимость излучения на определенной длине волны, вернее, в узком спектральном диапазоне. Эта информация представляет особую ценность для тестирования моделей физической и химической кинетики возбуждения и дезактивации электронно-возбужденных состояний атомов и молекул, ответственных за излучение газа на данной длине волны [73]. Подобные измерения проводятся с использованием той же аппаратуры, которая регистрирует панорамные спектры излучения. На рис. 8 приведены примеры временных спектрограмм, полученных в ударно-нагретом воздухе при разных скоростях ударной волны и начальных давлениях в камере низкого давления [74]. Нулевой момент времени на горизонтальной оси соответствует моменту прихода газодинамического фронта к оптической оси наблюдения. Во всех приведенных случаях наблюдаемая длительность излучения слабо зависит от длины волны и равна примерно 1 мкс. Малая продолжительность излучения связана с быстрым падением температуры в молекулярном газе за счет энергоемких процессов возбуждения внутренних степеней свободы и диссоциации, что ведет к уменьшению скорости образования электронов и, соответственно, возбуждения атомов и молекул.

Как видно из рис. 8а, интенсивность излучения *I* атомарного азота на длине волны $\lambda = 149.3$ нм быстро растет при увеличении скорости ударной вол-

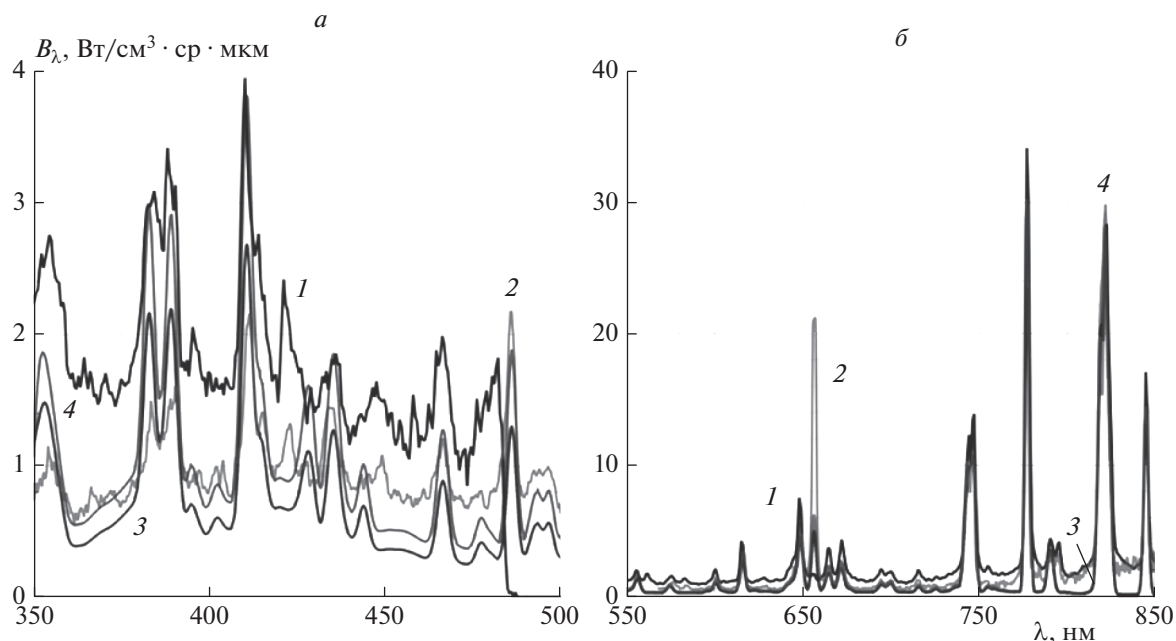


Рис. 6. Спектральная плотность излучения воздуха при $p_0 = 0.2$ Торр и $V_{SW} = 10.2$ км/с в спектральных диапазонах UV/Vis (а) и IR (б), измеренная на установках EAST (1) и Т6 (2), и ее сравнение с расчетными данными по программам NEQAIR (3) и HARA (4) [57].

ны V_{SW} и, соответственно, температуры газа за фронтом ударной волны. При этом максимум излучения сдвигается вправо при увеличении V_{SW} , а ширина неравновесной зоны излучения немного увеличивается. Временная зависимость интенсивности излучения I линии с $\lambda = 213$ нм молекулы NO при начальном давлении 1 Торр и различных скоростях ударной волны приведена на рис. 8б. Здесь, как и в предыдущем случае, наблюдается сильная зависимость максимального значения интенсивности излучения от скорости ударной волны. Результаты анализа экспериментальных данных, полученных при разных давлениях, показывают, что длительность излучения отдельной спектральной линии, а также ее максимальная интенсивность сильно увеличиваются с ростом начального давления [74].

Способность различных моделей адекватно описывать как неравновесное, так и равновесное излучение ударно-нагретого газа зависит от правильной интерпретации имеющихся экспериментальных данных и, в первую очередь, от метода выделения неравновесной зоны на временной спектрограмме излучения различных линий [75]. В экспериментах, проведенных на установке EAST, для определения неравновесных спектральных данных используется так называемая абсолютная неравновесная метрика, когда уровень неравновесного излучения определяется путем интегрирования интенсивности излучения на спектрограмме в пределах 2 см по обе стороны от

пикового значения. На рис. 9 приводится сравнение равновесной и неравновесной спектрограмм излучения воздуха при давлении перед ударной волной $p_0 = 0.2$ Торр и скорости ударной волны $V_{SW} = 9.53$ км/с в спектральном диапазоне VUV [76]. Видно, что неравновесная зона дает вклад в общую спектральную плотность энергии излучения воздуха, равный примерно 20%.

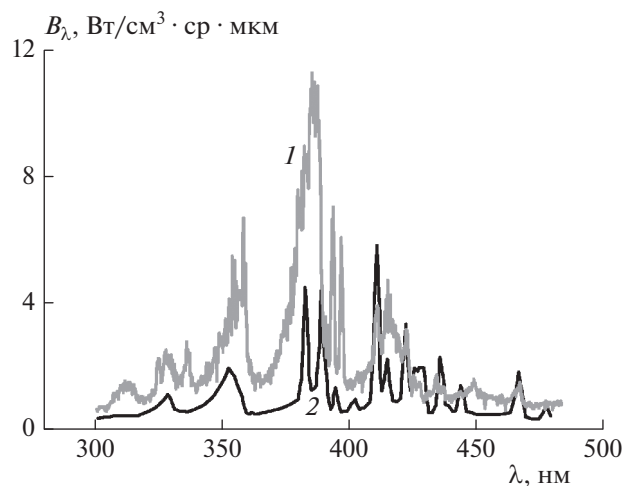


Рис. 7. Сравнение панорамных спектров излучения воздуха, полученных на ударных установках DDST-M при $p_0 = 0.25$ Торр и $V_{SW} = 10.4$ км/с (1) и EAST при $p_0 = 0.2$ Торр и $V_{SW} = 10.35$ км/с (2) [49].

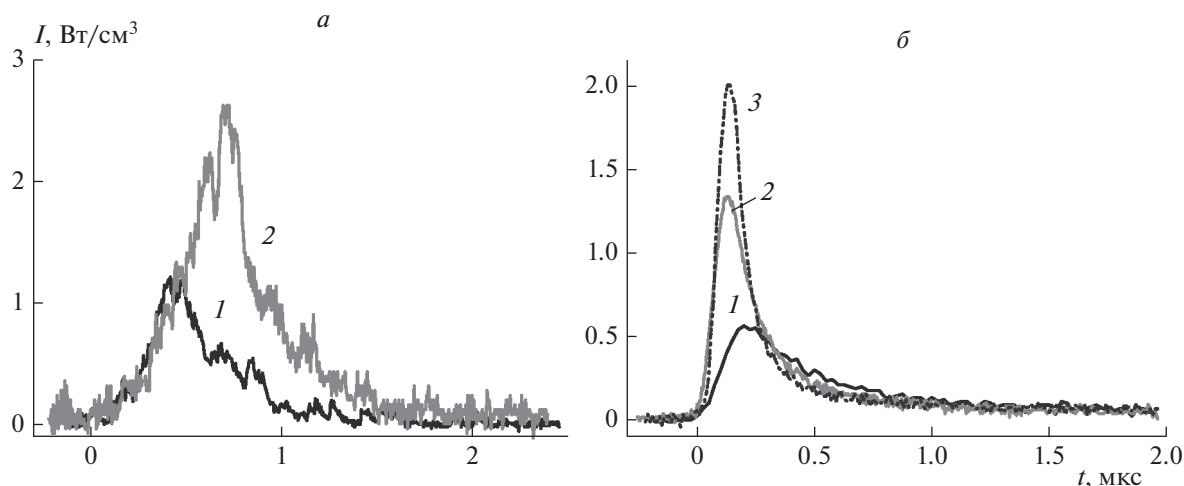


Рис. 8. Зависимость от времени интенсивности излучения спектральной линии с $\lambda = 149.3$ нм атома азота (а) при начальном давлении $p_0 = 0.25$ Торр и $V_{SW} = 7.9$ (1) и 9.2 км/с (2), а также и спектральной линии с $\lambda = 213$ нм молекулы NO (б) при начальном давлении $p_0 = 1$ Торр и $V_{SW} = 5.0$ (1), 5.9 (2) и 6.8 км/с (3) [74].

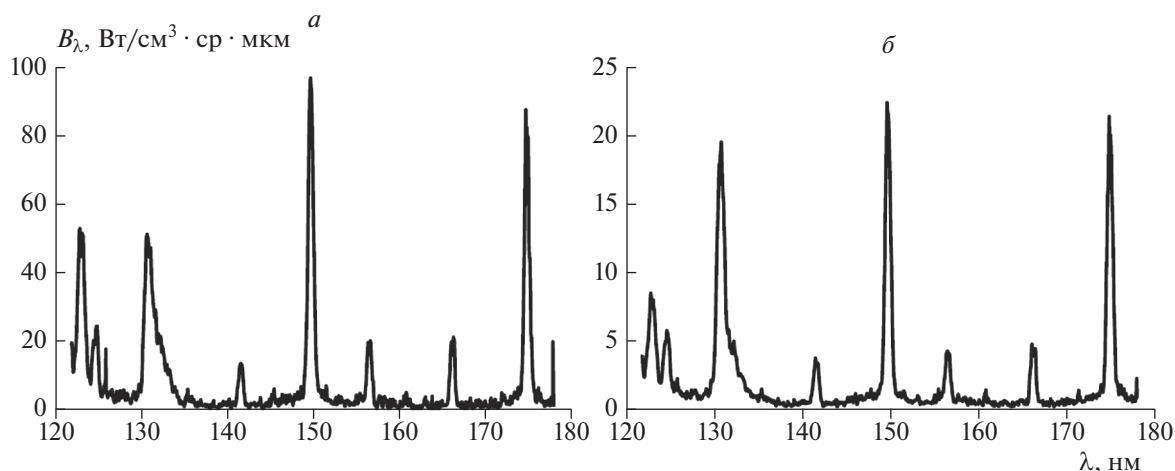


Рис. 9. Равновесная (а) и неравновесная (б) спектральная плотность энергии излучения воздуха при $p_0 = 0.2$ Торр и $V_{SW} = 9.53$ км/с [76].

ИЗЛУЧЕНИЕ АТМОСФЕРНЫХ ГАЗОВ ДРУГИХ ПЛАНЕТ

Излучательные характеристики ударно-нагретых газовых смесей, моделирующих состав атмосфер других планет Солнечной системы, менее изучены, чем соответствующие характеристики воздуха. Наибольший объем экспериментальной информации получен для атмосфер Марса и Венеры, которые состоят в основном из CO_2 (порядка 95%) и N_2 (порядка 3%) [25, 30, 33, 43, 61, 77–85]. Несколько работ посвящено измерению излучения ударно-нагретого газа, моделирующего атмосферу Титана, которая помимо молекулярного азота содержит небольшое количество метана (2–5%) [83, 86–88]. Соответствующие данные

для атмосфер планет-гигантов (Сатурн, Уран), состоящих в основном из молекулярного водорода, приведены в работах [89, 90].

На рис. 10 представлен панорамный спектр излучения смеси CO_2 (70%) и N_2 (30%), моделирующей атмосферу Марса, который получен в ударной трубе DDST-M при $p_0 = 0.3$ Торр и скоростях ударной волны порядка 7 км/с, что примерно соответствует второй космической скорости для Марса [84]. Видно, что в спектральном диапазоне $\lambda = 200\text{--}300$ нм интенсивность излучения слабо зависит от скорости ударной волны и определяется в основном совокупностью полос четвертой положительной системы молекулы CO, которая формируется в электронном переходе $A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ [91].

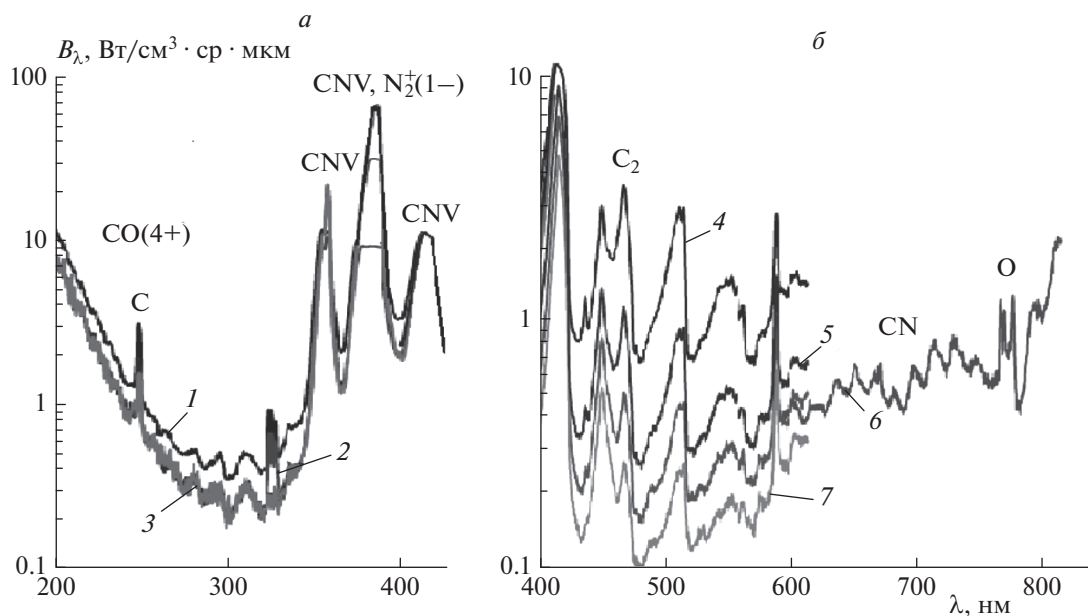


Рис. 10. Спектральная плотность излучения B_λ ударно-нагретой смеси CO_2/N_2 в спектральных диапазонах 200–420 нм (а) и 400–850 нм (б) при начальном давлении $p_0 = 0.3$ Торр и $V_{SW} = 7.35$ (1), 6.94 (2), 6.76 (3), 7.58 (4), 6.76 (5), 6.58 (6) и 6.33 км/с (7) [84].

В этом же спектральном диапазоне регистрируется излучение молекулы $\text{NO}(\beta, \gamma, \delta)$, а также второй положительной системы молекулы азота $\text{N}_2(2+)$. В спектральном диапазоне $\lambda = 300\text{--}450$ нм основной вклад в излучение нагретого газа дает фиолетовая система полос цианистого радикала CN , которая формируется в электронном переходе $B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ с максимумами интенсивности при $\lambda = 358, 386, 410$ и 450 нм [92]. В окрестности длины волны $\lambda = 386$ нм локализуется также излучение первой отрицательной системы молекулярного иона N_2^\pm .

В спектральном диапазоне $\lambda = 450\text{--}850$ нм (рис. 10б) интенсивность излучения сильно зависит от скорости ударной волны. Здесь основной вклад в излучение дает система полос Свана молекулы C_2 , формирующаяся в переходе $d^3\Pi_g \rightarrow a^3\Pi_u$ и наблюдающаяся в интервале $\lambda = 450\text{--}570$ нм [93]. Видно, что излучение системы полос Свана играет заметную роль только при скоростях ударной волны выше 6 км/с. В этом спектральном диапазоне при скоростях ударной волны выше 5 км/с наблюдается также красная система полос цианистого радикала CN , которая формируется в электронном переходе $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ с максимумом интенсивности при $\lambda = 790$ нм.

Большой объем исследований по измерению спектров излучения ударно-нагретых газов применительно к условиям входа КА в атмосферы Марса и Венеры проведен в ударной трубе EAST [25, 55, 75, 79]. Получены панорамные и инте-

гральные спектры излучения в интервале длин волн λ от 120 до 1650 нм при скоростях ударной волны V_{SW} в интервале от 3 до 12 км/с и начальных давлениях газа перед ударной волной p_0 в интервале от 0.1 до 2.0 Торр. На рис. 11 показан относительный вклад различных спектральных диапазонов в общую интенсивность излучения смеси, моделирующей атмосферу Марса [79]. Данные приведены для трех экстремальных условий по скоростям ударной волны и начальным давлениям. Видно, что спектральные области VUV и дальнего UV ($\lambda = 125\text{--}215$ нм), излучение в которых определяется системой полос $\text{CO}(4+)$ и отчасти $\text{NO}(\beta, \gamma, \delta)$, являются наиболее значительными радиационными областями во всех изученных условиях, составляя от 54% до 64% от общей интенсивности излучения. Область длин волн между 330 и 480 нм в основном связана с излучением CN и вносит значительный вклад в суммарную плотность энергии излучения при низкой скорости ударной волны (30% при $V_{SW} = 6.8$ км/с). По мере увеличения скорости роль этой области уменьшается (до 6% при $V_{SW} = 11.5$ км/с), что связано с диссоциацией CN .

Экспериментальные данные по радиационным характеристикам ударно-нагретой смеси, моделирующей атмосферу Титана, получены на ударных установках EAST [86] и X2 [87, 88]. На рис. 12 проводится сравнение панорамных спектров излучения, измеренных на этих установках в диапазоне длин волн $\lambda = 310\text{--}435$ нм. Наблюдается достаточно хорошее согласие приведенных

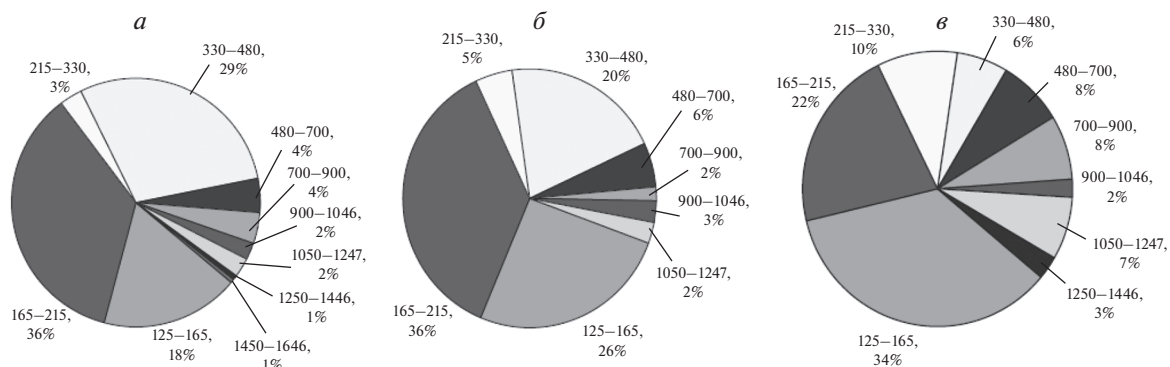


Рис. 11. Относительные вклады различных спектральных областей в суммарную плотность излучения смеси CO_2 (96%) и N_2 (4%) для трех тестовых случаев: $p_0 = 0.25$ Торр и $V_{SW} = 6.8$ км/с (а); $p_0 = 0.1$ Торр и $V_{SW} = 8.5$ км/с (б); $p_0 = 0.5$ Торр и $V_{SW} = 11.5$ км/с (в) [79].

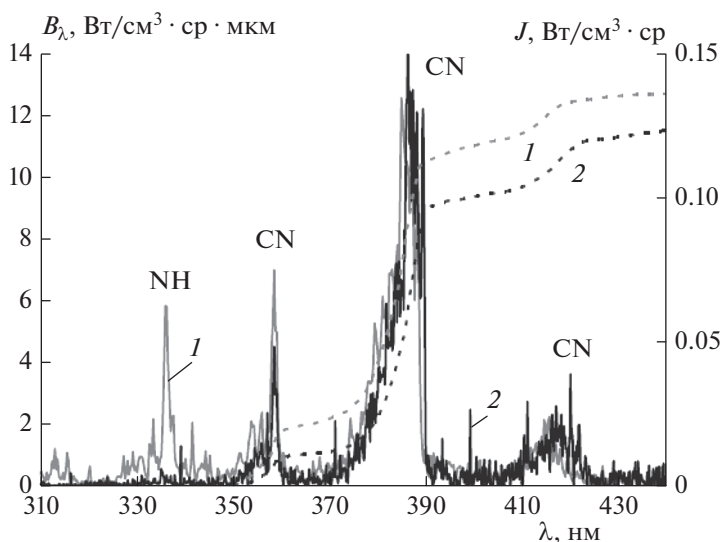


Рис. 12. Спектральная (сплошные линии) и суммарная (штриховые линии) плотность излучения смеси N_2 (98%) и CH_4 (2%), моделирующей атмосферу Титана, при $p_0 = 0.1$ Торр и $V_{SW} = 5.7$ км/с: 1 и 2 – экспериментальные данные, полученные на установках EAST [86] и X2 [88] соответственно.

данных для фиолетовой системы полос цианистого радикала CN. Основное различие между двумя спектрами состоит в том, что пик на длине волны $\lambda = 336.3$ нм, соответствующий электронному переходу $A^3\Pi \rightarrow X^3\Sigma^-$ радикала NH [94], который очень заметен в данных, полученных на установке EAST, не проявляется в значительной степени в данных X2. Несмотря на различия в спектральной плотности излучения, значения суммарной плотности излучения в двух случаях различаются лишь на 10%.

ВЫВОДЫ

1. Изучение радиационных характеристик ударно-нагретых газов проводится на различных

ударных установках. Наиболее широкие возможности для получения спектроскопической информации предоставляют электроразрядные установки. Ударные установки на детонационном горении намного дешевле поршневых и электроразрядных, так как не нуждаются в каких-либо сложных механических и электроразрядных устройствах и, соответственно, требуют гораздо меньшего опыта эксплуатации. Но на них не удается получить скорость ударной волны выше 12 км/с.

2. Многочисленные эксперименты, проведенные в ударных трубах, позволили получить большой объем информации по излучению ударно-нагретых газовых смесей, моделирующих условия входа космических аппаратов в атмосферу Земли и других планет Солнечной системы. К ней, в

частности, относятся интегральные по времени развертки излучения (панорамные спектры) в интервале длин волн от 120 до 1100 нм. Анализ панорамных спектров позволяет выделить основные закономерности излучения высокотемпературного газа на различных участках траектории спуска КА в зависимости от скорости ударной волны и начального давления газа.

3. Эксперименты в ударных трубах позволяют также измерить временную зависимость излучения на определенной длине волны. Эта информация представляют особую ценность для тестирования моделей физической и химической кинетики возбуждения и дезактивации электронно-возбужденных состояний атомов и молекул, ответственных за излучение газа на данной длине волны.

Работа выполнена при поддержке Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 20-08-00343), а также в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации “Экспериментальное и теоретическое исследование кинетических процессов в газах” (регистрационный номер АААА-А19-119012990112-4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Uyanna O., Najafi H.* // Acta Astronaut. 2020. V. 176. P. 341.
2. *Shang J.S., Surzhikov S.T.* // Prog. Aerospace Sci. 2012. V. 53. P. 46.
3. *Brandis A.M., Johnson C.O., Cruden B.A.* // AIAA Paper. 2016. № 2016-3690.
4. *Wei H., Morgan R.G., McIntyre T.J., Brandis A.M., Johnson C.O.* // AIAA Paper. 2017. № 2017-4531.
5. *Surzhikov S.* // AIAA Paper. 2017. № 2017-1147.
6. *Dikalyuk A.S., Kozlov P.V., Romanenko Y.V., Shatalov O.P., Surzhikov S.T.* // AIAA Paper. 2013. № 2013-2505.
7. *Cruden B.A., Brandis A.M.* // AIAA Paper. 2017. № 2017-4535.
8. *Суржиков С.Т.* // Теплофизика высоких температур. 2016. Т. 54. № 2. С. 249.
9. *Zhao Y., Huang H.* // Acta Astronaut. 2020. V. 169. P. 84.
10. *Campoli L., Kunova O., Kustova E., Melnik M.* // Acta Astronaut. 2020. V. 175. P. 493.
11. *Collen P.L., Doherty L.J., McGilvray M. et al.* // AIAA Paper. 2019. № 2019-1941.
12. *Yuan C.K., Zhou K., Liu Y.F., Hu Z.M., Jiang Z.L.* // Acta Mech. Sin. 2019. V. 35. P. 24.
13. *Vargas J., Lopez B., Lino da Silva M.* // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2020. V. 245. № 106848.
14. Experimental methods of shock wave research / Eds. Igra O., Seiler F. N.Y.: Springer, 2016.
15. *Reyner P.* // Prog. Aerospace Sci. 2016. V. 85. P. 1.
16. *Gu S., Olivier H.* // Prog. Aerospace Sci. 2020. V. 113. № 100607.
17. *Mirels H.* // Phys. Fluids. 1963. V. 6. P. 1201.
18. *Stalker R.J., Paull A., Mee D.J., Morgan R.G., Jacobs P.A.* // Prog. Aerospace Sci. 2005. V. 41. P. 471.
19. *Morgan R.G.* // AIAA Paper. 1997. № 97-0279.
20. *Brandis A.M., Johnston C.O., Cruden B.A., Prabhu D., Bose D.* // AIAA Paper. 2012. № 2012-2865.
21. *Oliver H., Zonglin J., Yu H.R., Lu F.K.* // Prog. Astronaut. Aeronaut. 2002. V. 198. P. 135.
22. *Grinstead J.H., Wilder M.C. et al.* // AIAA Paper. 2008. № 2008-1244.
23. *Brandis A.M., Johnston C.O., Cruden B.A., Prabhu D., Bose D.* // J. Thermophys. Heat Trans. 2015. V. 29. P. 209.
24. *Lemal A., Jacobs C.M., Perrin M.-Y. et al.* // J. Thermophys. Heat Trans. 2016. V. 30. P. 197.
25. *Cruden B.A., Prabhu D., Martinez R., Le H.* // AIAA Paper. 2010. № 2010-4508.
26. *Wadhams T.P., Cassady A.M., MacLean M., Holden M.S.* // AIAA Paper. 2009. № 2009-677.
27. *Dufrene A., Holden M.* // AIAA Paper. 2011. № 2011-626.
28. *Parker R., Dufrene A., Holden M., Wakeman T.* // AIAA Paper. 2011. № 2011-715.
29. *Gorelov V.A., Kireev A.Yu., Shilenkov S.V.* // AIAA Paper. 2004. № 2004-2308.
30. *Горелов В.А., Киреев А.Ю., Шиленков С.В.* // ПМТФ. 2005. Т. 46. № 2. С. 13.
31. *Горелов В.А., Киреев А.Ю.* // ПМТФ. 2016. Т. 57. № 1. С. 176.
32. *Wei H., Morgan R.G., McIntyre T.J.* // AIAA Paper. 2017. № 2017-4531.
33. *Takayanagi H., Lemal A., Nomura S., Fujita K.* // AIAA Paper. 2017. № 2017-1369.
34. *McGilvray M., Doherty L.J., Morgan R.G., Gildfind D.E.* // AIAA Paper. 2015. № 2015-3543.
35. *Collen P., Doherty L.J., Subiah S.D. et al.* // Exp. Fluids. 2021. V. 62. P. 225.
36. *Shen J., Ma H., Li C., Chen X., Zhixian B.* // Proc. 31st Intern. Sympos. Shock Waves. Springer, 2019. P. 213.
37. *Chue R.S.M., Tsai C.Y., Bakos R.J.* // Shock waves. 2003. V. 13. P. 367.
38. *Tsai C.Y., Chue R., Nicilson C., Tyll J.* // AIAA Paper. 2009. № 2009-1516.
39. *Hombsch M., Oliver H.* // J. Spacecraft Rockets. 2013. V. 50. P. 742.
40. *Yuan C.K., Zhou K., Liu Y.F., Hu Z.M., Jiang Z.L.* // Acta Mech. Sin. 2019. V. 35. P. 24.
41. *Wang Q., Luo K., Li J., Li J., Zhao W.* // Sin. J. Astronaut. 2020. V. 33. P. 1468.
42. *Lino da Silva M.,erreira R., Vargas J. et al.* // AIAA Paper. 2020. № 2020-0624.
43. *Анохин Е.М., Иванова Т.Ю., Кудрявцев Н.Н., Стариковский А.Ю.* // Теплофизика высоких температур. 2007. Т. 45. № 6. С. 807.
44. *Косарев И.Н., Hudnova M.M., Сагуленко П.Н., Хорунженко В.И., Кудрявцев Н.Н.* // Докл. РАН. 2011. Т. 441. № 6. С. 747.
45. *Ibragimova L.B., Sergievskaya A.L., Levashov V.Yu. et al.* // J. Chem. Phys. 2013. V. 139. № 034317.
46. *Kozlov P.V., Bykova N.G., Levashov V.Yu., Zabelinskii I.E.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1250. № 012017.

47. Быкова Н.Г., Забелинский И.Е., Ибрагимова Л.Б. и др. // Хим. физика. 2018. Т. 37. № 2. С. 35.
48. Забелинский И.Е., Козлов П.В., Акимов Ю.В. и др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 11. С. 22.
49. Kozlov P.V., Zabelinsky I.E., Bykova N.G. et al. // Acta Astronaut. 2021; <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2021.10.032>
50. Brandis A.M., Johnston C.O., Cruden B.A., Prabhu D. // J. Thermophys. Heat Trans. 2017. V. 31. № 1. P. 178.
51. McGilvray M., Doherty L.J., Morgan R.G., Gildfind D.E. // AIAA Paper. 2015. № 2015-3545.
52. Yamada G., Suzuki T., Takayanagi H., Fujita K. // Trans. Japan Soc. Aero. Space Sci. 2011. V. 54. № 183. P. 51.
53. Kozlov P.V. // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. V. 1009. № 012024.
54. Козлов П.В., Забелинский И.Е., Быкова Н.Г. др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 8. С. 26.
55. Cruden B.A. // Von Karman Inst. Lecture Ser. 2014. № STO-AVT-218-VKI.
56. Cruden B.A., Martinez R., Grinstead J.H., Olejniczak J. // AIAA Paper. 2009. № 2009-4240.
57. Collen P.L., Doherty L.J., McGilvray M. // Intern. Conf. FAR-2019. 2019. № 1053360.
58. Parker R., Dufrene A., Holden M., Wakeman T. // AIAA Paper. 2017. № 2011-715.
59. Sheikh U.A., Morgan R.G., McInture T.J. // AIAA J. 2015. V. 53. № 12. P. 3589.
60. Takayanagi H., Lemal A., Nomura S., Fujita K. // J. Thermophys. Heat Trans. 2018. V. 32. № 2. P. 483.
61. Lee E. S., Park C., Chang K.S. // Ibid. 2007. V. 21. № 1. P. 50.
62. Anohin E.M., Ivanova T.Yu., Koudriavtsev N.N., Starikovskii A.Yu. // AIAA Paper. 2005. № 2005-792.
63. Gorelov V.A., Kireev A.Yu., Shilenkov S.V., Surzhikov S.T. // AIAA Paper. 2004. № 2004-2380.
64. Kozlov P.V., Surzhikov S.T. // AIAA Paper. 2017. № 2017-0157.
65. Nassar H., Pellerin S., Musiol K. et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2004. V. 37. № 14. P. 1904.
66. Nassar H. // J. Phys.: Conf. Ser. 2012. V. 370. № 012050.
67. Parker D.H. // Acc. Chem. Res. 2000. V. 33. № 8. P. 563.
68. Whiting E., Park C., Liu Y., Arnold J., Paterson J. // NASA Ref. Publ. 1996. № 1389.
69. Bose D., McCorkle E., Bogdanoff D., Allen G.A., Jr. // AIAA Paper. 2009. № 2009-1030.
70. Park C. Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics. N.Y.: Wiley, 1990.
71. Johnston C.O., Hollis B.R., Sutton K. // J. Spacecraft Rockets. 2008. V. 45. № 5. P. 865.
72. Brandis A.M., Cruden B.A., Prabhu D. et al. // AIAA Paper. 2010. № 2010-4510.
73. Суржииков С.Т. // Изв. РАН. МЖТ. 2019. № 1. С. 99.
74. Kozlov P.V., Zabelinsky I.E., Bykova N.G., Gerasimov G.Ya., Levashov V.Yu., Tereza A.M. // 28th Intern. Colloq. Dynam. Explos. React. Syst. Napoli: ICDERS, 2022.
75. Brandis A.M., Johnston C.O., Cruden B.A., Prabhu D.K. // AIAA Paper. 2013. № 2013-1055.
76. Brandis A.M., Cruden B.A. // AIAA Paper. 2017. № 2017-1145.
77. Bose D., Grinstead J.H., Bogdanoff D.W., Wright M.J. // NASA Tech. Rep. 2009. № ARC-E-DAA-TN315.
78. Grinstead J.H., Wright M.J., Bogdanoff D.W., Allen G.A. // J. Thermophys. Heat Trans. 2009. V. 23. № 2. P. 249.
79. Cruden B.A., Prabhu D., Martinez R. // J. Spacecraft Rockets. 2012. V. 49. № 6. P. 1069.
80. Brandis A.M., Johnson C.O., Cruden B.A. et al. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2013. V. 121. P. 91.
81. Ramesh R., Kelly R.M., Cullen T.G., Mee D.J., Morgan R.G. // AIAA Paper. 2019. № 2019-3006.
82. Залогин Г.Н., Козлов П.В., Кузнецова Л.А. др. // ЖТФ. 2001. Т. 71. № 6. С. 10.
83. Dikalyuk A.S., Surzhikov S.T., Shatalov O.P., Kozlov P.V., Romanenko Y.V. // AIAA Paper. 2012. № 2012-0795.
84. Козлов П.В., Забелинский И.Е., Быкова Н.Г., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 12. С. 23.
85. Дикалюк А.С., Суржииков С.Т. // Теплофизика высоких температур. 2014. Т. 52. № 1. С. 39.
86. Bose D., Wright M.J., Bogdanoff D.W., Raiche G.A., Allen G.A. // J. Thermophys. Heat Trans. 2006. V. 20. № 2. P. 220.
87. Jacobs C.M., Morgan R.C. // AIAA Paper. 2009. № 2009-1029.
88. Brandis A.M., Morgan R.G., McIntyre T.J., Jacobs P.A. // J. Thermophys. Heat Trans. 2010. V. 24. № 2. P. 291.
89. Cruden B.A., Bogdanoff D.W. // J. Spacecraft Rockets. 2017. V. 54. № 6. P. 1246.
90. Colonna G., Pietanza L.D., Laricchiuta A. // Intern. J. Heat Mass Transf. 2020. V. 156. № 119916.
91. McGuire S.D., Tibère-Inglessea A.C., Mariotto P.B. et al. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2020. V. 245. P. 106855.
92. Ridenti M.A., Amorim J. // Plasma Chem. Plasma Process. 2018. V. 38. P. 311.
93. Carbone E., D'Isa F., Hecimovic A., Fantz U. // Ibid. 2020. V. 29. No. 055003.
94. Zhou M., Zhu Z. // Comput. Theor. Chem. 2021. V. 1204. № 113358.

**ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ**

УДК 533.1

РЕГИСТРАЦИЯ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ГОРЮЧЕЙ СМЕСИ В УДАРНОЙ ТРУБЕ С ПОМОЩЬЮ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ДЕТЕКТОРА

© 2022 г. М. А. Котов¹, П. В. Козлов², Г. Я. Герасимов², В. Ю. Левашов^{2*},
А. Н. Шемякин¹, Н. Г. Соловьев¹, М. Ю. Якимов¹, В. Н. Глебов³,
Г. А. Дуброва³, А. М. Малютин³

¹Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук, Москва, Россия

²Институт механики Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

³Институт проблем лазерных и информационных технологий Российской академии наук – филиал ФНИЦ
“Кристаллография и фотоника” РАН, Шатура, Россия

*E-mail: vyl69@mail.ru; levashovvy@imec.msu.ru

Поступила в редакцию 10.01.2022;

после доработки 11.02.2022;

принята в печать 21.02.2022

Продемонстрирована возможность использования термоэлектрического детектора для измерения времени задержки воспламенения горючей смеси за фронтом отраженной ударной волны. Это устройство уже использовалось для регистрации тепловых потоков в ударных трубах и впервые применено для регистрации процесса воспламенения горючих смесей. В ходе экспериментов с пропан-воздушными смесями было установлено, что термоэлектрический детектор способен регистрировать большие значения теплового потока, малую инерционность, высокое отношение сигнал/шум и высокое временное разрешение. Было также показано, что за счет более быстрого времени срабатывания использование датчика позволяет уточнить время задержки воспламенения смеси, а сам датчик может служить полезным прибором, позволяющим более детально изучать процессы воспламенения горючих смесей в ударных трубах.

Ключевые слова: горючая смесь, время задержки воспламенения, ударная труба, тепловой поток, термоэлектрический детектор.

DOI: 10.31857/S0207401X22080064

ВВЕДЕНИЕ

Понимание процесса воспламенения и горения углеводородных топлив в двигательных установках играет первостепенную роль при их совершенствовании и создании двигателей нового поколения [1–3]. Это стимулировало проведение многочисленных экспериментальных и расчетно-теоретических исследований, связанных с изучением особенностей процесса в различных условиях [4–6]. Большой объем экспериментальной информации по воспламенению различных горючих смесей был получен в ударных трубах [7–9]. В настоящее время в различных исследовательских центрах эксплуатируется большое количество ударных труб, которые отличаются друг от друга конструкцией, размерами и целью проводимых исследований [10].

Регистрация параметров процесса воспламенения горючих смесей в ударных трубах осуществляется с помощью различных средств измерения, которые обладают высоким временным разрешением и способны работать в агрессивных

газодинамических средах. Использование быстродействующих датчиков давления совместно с применением средств визуальной и спектроскопической регистрации позволяет не только измерять время задержки воспламенения смеси за падающей или отраженной ударной волной, но и оценивать пространственно-временные характеристики процесса [11–13]. Значения температуры и теплового потока получают в таких экспериментах косвенным путем. Обычно их рассчитывают с помощью различных вычислительных программ [14].

Использование датчиков контактной регистрации тепловых параметров ударно-нагретого газа затруднительно, так как из-за высоких температур и давлений большинство этих датчиков выходят из строя и перестают функционировать. С другой стороны, данные, полученные от таких устройств, очень сложно интерпретировать в связи с тем, что параметры окружающей среды далеки от рабочего диапазона их нормального функционирования. Особенно это касается быстро-

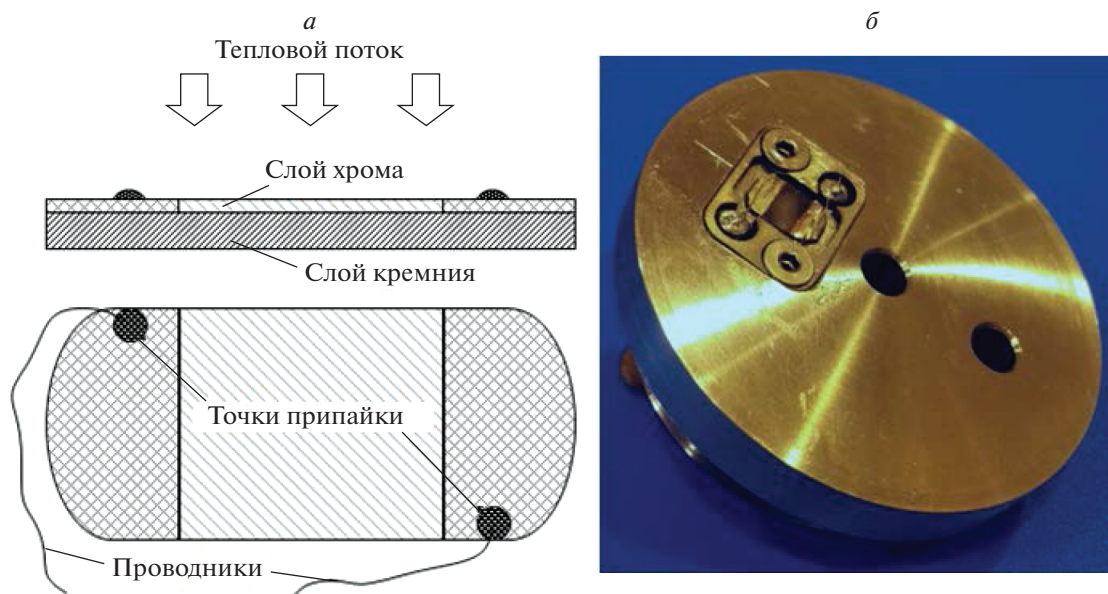


Рис. 1. Схематическое изображение термоэлектрического датчика (а) и его расположение на торцевой стенке ударной трубы (б).

действующих измерительных приборов [15]. Тем не менее имеются публикации, показывающие успешное функционирование быстродействующих датчиков регистрации тепловых параметров потока при температурах торможения порядка 1500 К и высоких давлениях в ударных трубах [16, 17].

Следует отметить, что информация по использованию датчиков теплового потока для изучения воспламенения углеводородных топлив в ударных трубах в настоящее время отсутствует. В то же время при испытаниях разработанного недавно термоэлектрического детектора [18] получены хорошие результаты в экспериментах с отраженной ударной волной малой интенсивности, в которых зарегистрированное время нарастания сигнала было меньше, чем у хорошо проверенных высокочастотных датчиков давления. Настоящая работа посвящена применению этого прибора для измерения времени задержки воспламенения пропан-воздушных смесей в ударной трубе, а также изучению возможности контактной регистрации теплового потока с высоким временным разрешением.

ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ДЕТЕКТОР

Идея использования технологии измерения мощности лазерного излучения [19] для регистрации тепловых потоков в импульсных газодинамических процессах возникла в результате сотрудничества коллективов ИПМех РАН и ИПЛИТ РАН. Работа датчика основана на генерации тер-

моЭДС в направлении, перпендикулярном градиенту температуры в чувствительном элементе с анизотропией термоэлектрического коэффициента. Чувствительный элемент датчика содержит два слоя, как это показано на рис. 1а. Его основу составляет слой кремния толщиной 0.4 мм, термоокисленный с обеих сторон и обладающий высоким сопротивлением. На лицевую сторону датчика методом вакуумного напыления нанесена пленка из косога анизотропного слоя хрома толщиной 0.3 мкм в виде столбчатой структуры, наклоненной под углом 50° – 60° . Над слоем хрома по бокам располагаются контактные площадки, через которые происходит съем термоЭДС (точки припайки на рис. 1а). Для получения значений интенсивности теплового потока, направляемого к поверхности датчика в абсолютных единицах была проведена калибровка датчика с помощью вольфрамовой лампы и с использованием отраженной ударной волны в ударной трубе. Более подробную информацию об изготовлении датчика и процедурах калибровки можно найти в работе [18].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Эксперименты по воспламенению горючих смесей за отраженной ударной волной проводили в ударной трубе, входящей в состав экспериментального комплекса “Ударная труба” НИИ механики МГУ [20]. Схема экспериментальной установки и измерительной системы приведена на рис. 2. Внутренний диаметр трубы составляет 57 мм, длина камер высокого и низкого давления

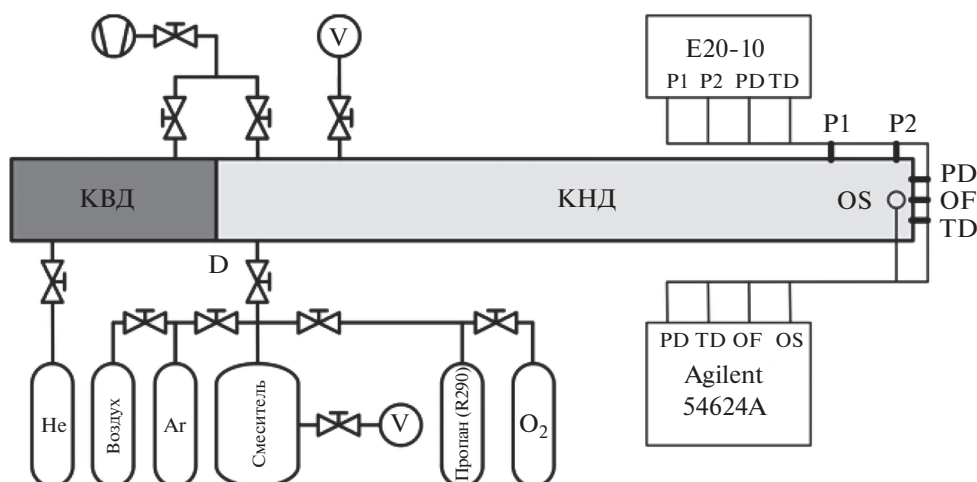


Рис. 2. Схема экспериментальной установки и измерительной системы; V – вакуумный насос.

(далее – КВД и КНД) равна соответственно 1.0 и 3.7 м. Между камерами устанавливалась медная диафрагма D с калиброванными насечками. Варьируя толщину диафрагмы, глубину насечек и давления в КВД и КНД, можно достичь необходимых параметров газовой среды за ударной отраженной волной. Более подробное описание экспериментальной установки приведено в работе [21]. В качестве тестового газа использовалась смесь пропана (R290) и синтетического воздуха (21% O₂ и 79% N₂).

Измерительная система установки состоит из датчиков давления P1, P2 и PD (PCB113B24), термоэлектрического детектора TD, а также оптической системы OS и световода OF, которые настроены на определенные длины волн излучения ударно-нагретого газа. Пьезоэлектрические датчики давления P1 и P2 расположены на боковой поверхности трубы на расстоянии 50 мм друг от друга и служат для измерения скорости падающей ударной волны. Датчик давления PD располагается на торцевой стенке трубы на расстоянии 15 мм выше ее оси и позволяет определять момент прихода ударной волны к торцу трубы, измерять давление за отраженной ударной волной и регистрировать момент воспламенения смеси. Термоэлектрический датчик TD расположен на торцевой стенке трубы симметрично датчику давления PD относительно осевой линии трубы (см. рис. 1б).

Оптическая система OS служит для регистрации временного профиля и спектрального распределения излучения газа через кварцевые окна. Оптическая ось системы располагается перпендикулярно боковой поверхности трубы на расстоянии 7 мм от ее торца. Монохроматор MC-300 позволяет регистрировать профиль излучения с пространственным разрешением 1.5 мм. Секция

регистрации спектрального распределения излучения фиксирует интегральную по времени плотность излучения газа (панорамный спектр) в диапазоне длин волн $\lambda = 190\text{--}670$ нм на линейном CCD-детекторе Hamamatsu S11156 (Japan), установленном на выходе спектрографа Horiba-1603. Световод OF расположен в центре торцевой стенки трубы и позволяет регистрировать излучение на фотоэлектронном умножителе (ФЭУ) PMT 100. После световода перед ФЭУ устанавливаются интерференционные фильтры, настроенные на определенные длины волн.

В ходе эксперимента показания датчиков P1, P2, PD и TD регистрировались аналого-цифровым преобразователем E20-10 (L-Card) с частотой 2.5 МГц на канал. Показания датчиков PD, TD, OF и оптической системы OS регистрировались осциллографом Agilent 54624A производства фирмы “Agilent Technologies Inc.” (USA) в диапазоне 10–100 МГц на канал.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Оценка возможности использования термоэлектрического детектора для изучения воспламенения ударно-нагретых углеводородных топлив была проведена в серии экспериментов с различными пропан-воздушными смесями. Для определения времен задержки воспламенения (τ_{ign}) использовали показания датчика давления PD, оптической системы OS и световода OF, настроенных на длину волны $\lambda = 310$ нм излучения возбужденного радикала OH* за отраженной ударной волной, и термоэлектрического датчика TD. Величины τ_{ign} были измерены в диапазоне температур $T = 1330\text{--}1700$ К при давлении сжатого газа $p > 20$ атм и значениях коэффициента избытка топлива $\phi = 0.5, 1.0$ и 2.0. Для обеспечения

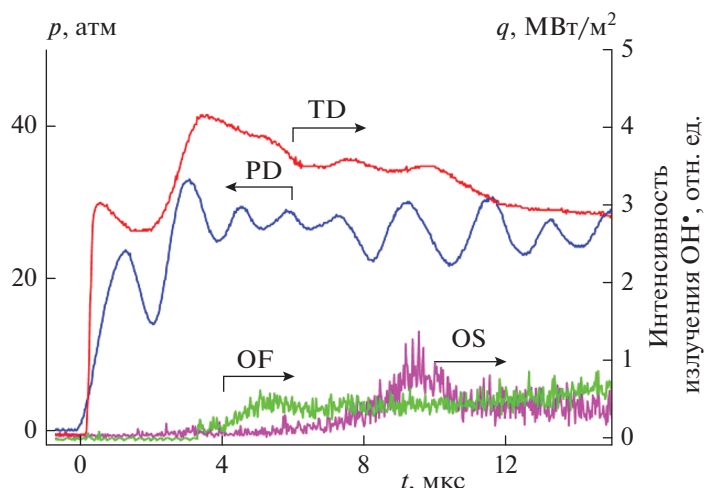


Рис. 3. Временные зависимости давления (PD), интенсивности теплового потока (TD) и интенсивности излучения радикалов OH^{\bullet} (OS и OF), зарегистрированные измерительной системой при воспламенении бедной пропан-воздушной смеси: $\phi = 0.5$, $T = 1644$ К и $p = 21.2$ атм.

надежности получаемых результатов каждое измерение проводили несколько раз при одних и тех же начальных условиях.

На рис. 3 приведены временные зависимости интенсивности теплового потока q , измеренного термоэлектрическим датчиком TD, а также давления и эмиссии радикала OH^{\bullet} , зарегистрированных датчиком PD и оптическими системами OS и OF соответственно. Данные получены для бедной пропан-воздушной смеси ($\phi = 0.5$) при температуре за отраженной ударной волной $T = 1644$ К и давлении $p = 21.2$ атм. Видно, что в рассматриваемых условиях термоэлектрический детектор TD хорошо фиксирует временную эволюцию теплового потока. Нарастание основного сигнала датчика TD после прихода и отражения ударной волны от торцевой стенки трубы составляет порядка 0.1 мкс, в то время как время отклика датчика давления PD равно примерно 1 мкс. Другими словами, в масштабе долей микросекунды термоэлектрический датчик способен регистрировать резкие изменения температурного градиента, что свидетельствует о его малой инерционности. С учетом инерционности датчиков кривые давления и интенсивности теплового потока на рис. 3 достаточно хорошо совпадают. Следует отметить, что при таких коротких временных масштабах для регистрации доступны большие значения интенсивности теплового потока: $q \geq 4$ МВт/м². При этом отношение сигнал/шум находится на достаточно высоком уровне, что позволяет распознавать все особенности, возникающие при воспламенении смеси и дальнейшем протекании процесса горения.

Традиционными диагностическими параметрами для определения времени задержки воспла-

менения (τ_{ign}) ударно-нагретой горючей смеси являются давление и интенсивность излучения возбужденных частиц, в частности радикала OH^{\bullet} [22]. Однако на малых временах (порядка нескольких микросекунд) точное определение такой задержки может быть затруднено из-за недостаточно малой инерционности датчика давления и ограниченной входной апертуры оптической системы. Как видно из рис. 3, показания датчика PD в рассматриваемых условиях не позволяют точно определить значение величины τ_{ign} . Воспламенение смеси начинается за отраженной ударной волной вблизи торца, что фиксируется датчиками TD и OF, причем датчик TD регистрирует начало воспламенения через 1.8 мкс после отражения ударной волны, а датчик OF срабатывает лишь через 3.7 мкс. Данная информация позволяет уточнить время задержки воспламенения. Регистрация сигнала оптической системой OS начинается через 7.5 мкс, когда отраженная ударная волна с горючей за ней смесью проходит мимо оптической оси системы.

На рис. 4 приведены характеристики воспламенения, полученные для бедной пропан-воздушной смеси ($\phi = 0.5$) при температуре за отраженной ударной волной $T = 1620$ К и давлении $p = 20.6$ атм. Состав и параметры газа за отраженной ударной волной являются примерно такими же, как и в предыдущем случае. Тем не менее ярко выраженного увеличения теплового потока, регистрирующего воспламенение смеси, здесь не наблюдается. Небольшие перегибы кривой зависимости интенсивности теплового потока от времени наблюдаются при временах 2 и 5 мкс. Время второго перегиба соответствует показаниям датчика OF. Скорее всего, воспламенение смеси в

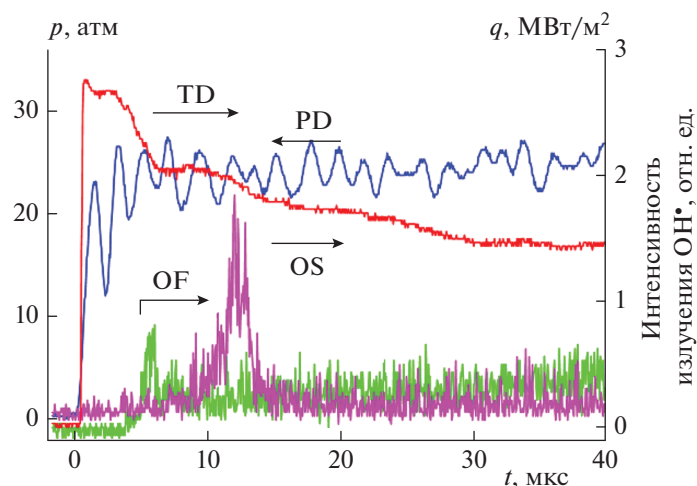


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, при $\phi = 0.5$, $T = 1620$ К и $p = 20.6$ атм.

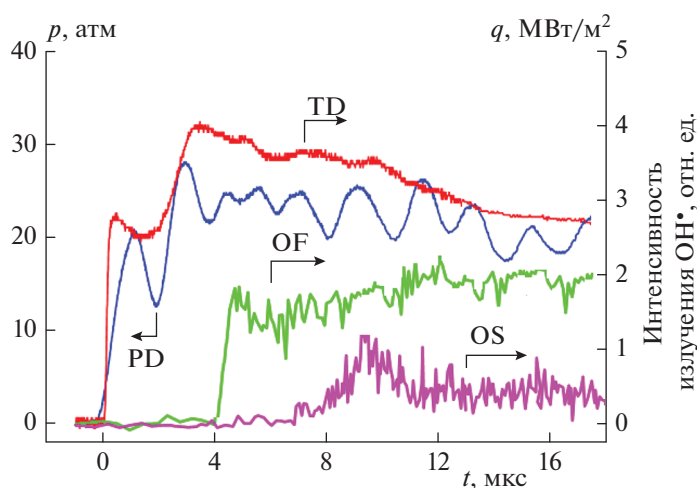


Рис. 5. То же, что и на рис. 3, при воспламенении стехиометрической пропан-воздушной смеси и $\phi = 1.0$, $T = 1670$ К и $p = 18.5$ атм.

данном случае происходит вблизи датчика OF, а датчик TD фиксирует распространение пламени по всему объему трубы.

Характер воспламенения стехиометрической пропан-воздушной смеси проиллюстрирован на рис. 5. Так как температура и давление за отраженной ударной волной примерно такие же, как и в предыдущем случае, а зависимость времени задержки воспламенения от величины ϕ для пропан-воздушной смеси при температурах выше 1000 К слабо выражена [23], изменение во времени показаний всех датчиков в общих чертах повторяет результаты, приведенные на рис. 3. Здесь также начало воспламенения, регистрируемое датчиком TD, наблюдается при $t = 2$ мкс, а датчик OF и оптическая система OS срабатывают при $t = 4$ и 8 мкс соответственно. Видно, что термоэлек-

трический детектор TD хорошо фиксирует временную эволюцию теплового потока, а датчик PD не позволяет точно определить время задержки воспламенения.

На рис. 6 приведены характеристики воспламенения богатой пропан-воздушной смеси ($\phi = 2.0$) при температуре за отраженной ударной волной $T = 1330$ К и давлении $p = 25.4$ атм. Так как время задержки воспламенения горючей смеси сильно зависит от температуры газа, в данном случае начало воспламенения, регистрируемое датчиком PD и системами OF и OS, наблюдается примерно через 75 мкс после отражения ударной волны от торцевой стенки трубы. Датчик TD регистрирует начало плавного роста интенсивности теплового потока при $t = 45$ мкс, который сменяется резким всплеском при $t = 82$ мкс. В целом, все измери-

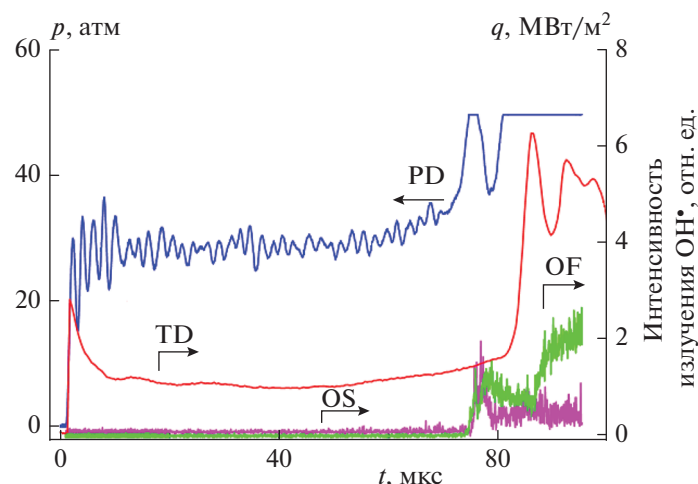


Рис. 6. То же, что и на рис. 2, при воспламенении богатой пропан-воздушной смеси и $\phi = 2.0$, $T = 1330$ К и $p = 25.4$ атм.

тельные каналы демонстрируют примерно одинаковую зависимость фиксируемого сигнала от времени.

Следует отметить, что в рассматриваемых масштабах времени из-за колебательного характера показаний датчика давления бывает очень сложно правильно определить начало воспламенения горючей смеси. Термоэлектрический детектор имеет меньшую инерционность. Поэтому он реагирует на изменение параметров среды быстрее, а фронт нарастания/спада фиксируемого сигнала у него короче. Особенно это касается воспламенения горючей смеси при повышенных температурах, когда τ_{ign} составляет величину порядка нескольких микросекунд. Таким образом, использование термоэлектрического датчика для регистрации процесса воспламенения горючей смеси в ударных трубах выглядит весьма перспективным, а само устройство можно считать надежным измерительным прибором с высоким временным разрешением.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сконструирован термоэлектрический детектор для измерения интенсивности тепловых потоков в ударных трубах. Этот прибор впервые успешно применен для регистрации параметров воспламенения пропан-воздушных смесей за отраженной ударной волной. В процессе экспериментов показано, что время отклика термоэлектрического детектора на резкое тепловое возмущение, вызванное приходом падающей ударной волны или началом воспламенения горючей смеси, меньше по сравнению с высокочастотным датчиком давления. Характер инерционности прибора позволяет регистрировать зависимость теплового потока от времени в масштабе десятых

долей микросекунды. Температурные градиенты, зафиксированные в процессе измерений, достигали 7 MW/m^2 в течение 0.5 мкс , причем начало фронтов подъема идеально совпадает с показаниями датчика давления. Показания термоэлектрического датчика позволяют уточнить время задержки воспламенения пропан-воздушной смеси, особенно при повышенных температурах, когда время задержки воспламенения составляет величину порядка нескольких микросекунд.

Авторы выражают благодарность В.А. Кузнецову за помощь в изготовлении необходимых деталей и конструктивных элементов установки.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 20-51-00003 (Бел_а)), а также в рамках госзаданий Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (регистрационные номера АААА-А19-119012990112-4 и АААА-А20-120011690135-5) и ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kindracki J.* // Shock Waves. 2014. V. 24. P. 603.
2. *Tian Y.S., Yang S., Xiao B., Zhong F., Le J.* // Acta Astronaut. 2019. V. 161. P. 425.
3. *Туник Ю.В., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 9. С. 8.
4. *Dagaut P., Cathonnet M.* // Prog. Energy Combust. Sci. 2006. V. 32. P. 48.
5. *Gonzalez-Juez E.D., Kerstein A.R., Ranjan R., Menon S.* // Prog. Energy Combust. Sci. 2017. V. 60. P. 26.
6. *Агафонов Г.Л., Тереза А.М.* // Хим. физика. 2015. Т. 34. № 2. С. 49.
7. *Hanson R.K., Davidson D.F.* // Prog. Energy Combust. Sci. 2014. V. 44. P. 103.

8. Experimental methods of shock wave research / Eds. Igra O., Seiler F. N.Y.: Springer, 2016.
9. Reyner P. // Prog. Aerospace Sci. 2016. V. 85. P. 1.
10. Gu S., Olivier H. // Prog. Aerospace Sci. 2020. V. 113. № 100607.
11. Козлов П.В., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю., Акимов Ю.В., Забелинский И.Е., Быкова Н.Г. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 9. С. 35.
12. Ninnemann E., Koroglu B., Pryor O. et al. // Combust. and Flame. 2018. V. 187. P. 11.
13. Kiverin A.D., Minaev K.O., Yakovenko I.S. // Ibid. 2020. V. 221. P. 420.
14. A Chemical Equilibrium Program for Windows; <http://www.gaseq.co.uk/>
15. Сапожников С.З., Митяков В.Ю., Митяков А.В. // Теплофизика высоких температур. 2004. Т. 42. № 4. С. 626.
16. Knauss H., Roediger T., Boutin D.A. et al. // J. Spacecr. Rockets. 2009. V. 46. P. 255.
17. Sapozhnikov S.Z., Mityakov V.Yu., Mityakov A.V. et al. // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. V. 891. № 012096.
18. Kotov M.A., Shemyakin A.N., Solovyov N.G. et al. // Appl. Therm. Eng. 2021. V. 195. № 117143.
19. Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano. / Ed. Rowe D.M. Boca Raton: CRC Press, 2006.
20. Экспериментальный комплекс “Ударная труба”; <https://istina.msu.ru/equipment/card/279166300/>
21. Козлов П.В., Акимов Ю.В., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю. // Теплофизика высоких температур. 2021. Т. 59. № 2. С. 231.
22. Petersen E.L. // Combust. Sci. Technol. 2009. V. 181. P. 1123.
23. Penyazkov O.G., Ragotner K.A., Dean A.J., Varatharajan B. // Proc. Combust. Inst. 2005. V. 30. P. 1941.

**ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ**

УДК 536.46

**ЭВОЛЮЦИЯ СТРУКТУРЫ И ФОРМЫ ФРОНТА РЕАКЦИИ
ПРИ УСКОРЕНИИ ПЛАМЕНИ И ПЕРЕХОДЕ ГОРЕНИЯ В ДЕТОНАЦИЮ**© 2022 г. П. Н. Кривошеев^{1*}, А. О. Новицкий¹, О. Г. Пенязьков¹¹Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова Национальной Академии наук Беларуси,
Минск, Республика Беларусь

*E-mail: krivosheev.pavlik@gmail.com

Поступила в редакцию 14.01.2022;
после доработки 17.02.2022;
принята в печать 21.02.2022

Для понимания механизмов и особенностей процесса ускорения пламени и перехода медленного горения в детонацию методом высокоскоростной съемки проведено экспериментальное исследование фронта пламени при горении предварительно перемешанной газовой смеси в длинной гладкой трубе с прозрачными стенками. Использовалась стехиометрическая смесь ацетилена с кислородом, разбавленная на 25% аргоном. Определена эволюция структуры и формы фронта пламени с момента инициирования горения слабым источником зажигания и до формирования детонационной волны. Выделены четыре характерные фазы процесса распространения: на первой стадии пламя ускоряется, затем следует стадия его замедления, период распространения пламени с почти постоянной скоростью и стадия повторного ускорения, в ходе которого и формируется детонация. Показано как меняется динамика процесса при изменении начального давления смеси. Детально описана наиболее интересная и малоизученная стадия процесса перехода горения в детонацию — стадия интенсивного повторного ускорения, в ходе которой пламя резко меняет свою форму.

Ключевые слова: медленное горение, ускорение пламени, структура и форма фронта пламени, переход горения в детонацию, самовоспламенение, взрыв, высокоскоростная съемка.

DOI: 10.31857/S0207401X22080076

ВВЕДЕНИЕ

При воспламенении смеси газообразного топлива с окислителем процесс медленного дозвукового горения (дефлаграция) наиболее вероятен, а механизм распространения дозвуковой волны горения заключается в переносе тепла и активных радикалов из зоны реакции к свежей смеси. Однако в ряде случаев при распространении в замкнутом объеме процесс развивается в нестационарном режиме и волна медленного горения может самопроизвольно ускоряться и переходить в детонационную [1–4]. Помимо экстремальной скорости распространения, волна детонации характеризуется гораздо более высокими, по сравнению с волной дозвукового горения, температурой и давлением. Мощность тепловыделения с единицы площади поверхности в детонационном фронте в тысячи раз выше, чем во фронте реакции при дефлаграции, а скорость продуктов детонации в десятки раз выше скорости продуктов медленного горения. На сегодняшний день принято считать, что именно детонация является самым эффективным, но и наиболее опасным режимом горения, а режимы нестационарного ускорения пла-

мени, в рамках которых реализуются условия для перехода к детонации, расцениваются как особенно разрушительные [5].

Быстрое распространение пламени и детонацию газов начали активно изучать в 20–30-е годы XX века. Широко использовались как контактные (измерения давления и скорости головной ударной волны, детонационной волны посредством пьезоэлектрических датчиков давления, измерения скорости фронта реакции с помощью датчиков тока ионизации, регистрация ячеистой структуры детонационной волны с помощью методики получения отпечатков на поверхности, покрытой слоем сажи) так и бесконтактные (регистрация излучения и поглощения, скоростная фотография с использованием теневых и интерференционных методов и т.д.) методы экспериментальной диагностики. Среди многообразия экспериментальных методов исследования скоростная фотография процесса является одним из наиболее информативных, дающих максимально наглядное и полное представление о процессе, его деталях и особенностях.

Первые фотографии фронта пламени и динамики изменения его формы во времени, при горении газа в трубе, вероятнее всего, были представлены в работе [6]. Используя уникальные для того времени методики и оборудование, авторы визуализировали распространение пламени в стеклянной трубке диаметром 25 мм и длиной 2 м в смеси окиси углерода с кислородом. Детальное, последовательное описание и теневые фотографии всех стадий процесса ускорения пламени и возникновения детонации впервые были представлены в работе [4].

Начальная стадия распространения пламени и последующее формирование его так называемой “тюльпанообразной” формы в закрытых и полукрытых трубах в дальнейшем подробно исследованы в работах [7–17] в большинстве случаев с использованием метода теневого фотографирования. Заключительная стадия ускорения пламени и возникновение условий для формирования детонационной волны стали предметом исследования в работах [18–27]. Были описаны различные режимы формирования детонации и представлены соответствующие теневые фотографии. Все работы, как правило, проводили в каналах прямоугольного сечения, что стало прямым следствием возможностей диагностики с использованием теневых и интерференционных методов визуализации течения.

Общим недостатком ранее выполненных экспериментальных работ оказалось то, что из-за несовершенства имеющейся на тот момент регистрирующей аппаратуры удавалось получать искомые изображения быстропротекающих процессов только в течение чрезвычайно короткого промежутка времени. Кроме того, размеры оптических окон для наблюдения были малы по сравнению с характерным масштабом самого процесса – длиной перехода горения в детонацию (ПГД). В совокупности это приводило к получению последовательности изображений только отдельных стадий процесса ускорения пламени либо формирования детонационной волны. Для получения информации о, например, более ранней или более поздней стадиях ускорения пламени при тех же начальных условиях приходилось менять положение измерительной секции, перемещая ее вдоль оси трубы. Все это накладывало существенные ограничения на возможности анализа всего процесса ПГД в целом, поскольку информация в виде последовательности изображений поступала разрозненно из разных серий экспериментов.

Несмотря на большое количество теоретических работ, описывающих процессы ускорения пламени и формирования детонации, в той или иной мере учитывающих влияние различного ро-

да физико-химических факторов (температуры, давления, плотности среды, ее вязкости и теплопроводности, турбулентности, кинетики химических реакций, граничных условий и т.д.) [28–70], единой теории процесса перехода горения в детонацию не существует. Это связано с ограниченностью самих моделей, неточным знанием значений большого количества различных констант, необходимых для описания химических и физических взаимодействий в системе в широком диапазоне термодинамических условий, а также с несовершенством численных методов решения уравнений, описывающих данный процесс. В ряде обзорных работ [71–73] обобщена имеющаяся по состоянию на 2007–2008 гг. информация по теоретическому и экспериментальному исследованию ускорения пламени и переходу горения в детонацию в газовых смесях. Полноценное трехмерное моделирование процесса ПГД с необходимым разрешением по времени и пространству в настоящее время вряд ли возможно, поскольку требует очень серьезных вычислительных мощностей. Однако следует ожидать, что по мере развития компьютерной техники в ближайшем будущем такое моделирование будет выполнено и потребуются сравнение полученных результатов с реальными экспериментальными данными.

С развитием современных средств фоторегистрации изображений (высокоскоростные цифровые камеры) появилась возможность получить детальную визуальную информацию о всем процессе ускорения пламени и перехода горения в детонацию полностью по всей длине канала, начиная с момента инициирования пламени локальным источником и заканчивая возникновением детонационной волны. Такая информация чрезвычайно полезна для понимания динамики процесса ускорения и пространственной конфигурации пламени в целом, поскольку дает возможность сравнить и верифицировать имеющиеся и разрабатываемые теоретические модели с реальными экспериментальными данными с высоким разрешением по времени и пространству. Цель настоящей работы – получение детальной, с высоким пространственно-временным разрешением визуальной информации обо всех стадиях процесса ускорения пламени и перехода медленного горения в детонацию, что позволит увидеть детали и понять физические механизмы явления.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА И МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

Для проведения экспериментов использовали калиброванную, с прозрачными стенками пластиковую трубу (торговая марка Plexiglas) цилин-

дрического сечения внутренним диаметром 60 мм и толщиной стенки 5 мм; длина трубы составляла 6 м (3 секции по 2 м каждая). Указанные размеры длины трубы и ее диаметр позволяли избежать эффектов, связанных с отражением волн сжатия от дальнего торца трубы и их взаимодействия с фронтом пламени на протяжении всего процесса горения вплоть до перехода в детонацию. Один из торцов трубы заглушен, в нем была установлена система инициирования горения. Другой конец трубы закрывался тонкой лавсановой диафрагмой, способной выдержать перепад давления в 1–1.5 атм. Перед проведением эксперимента проводили вакуумирование трубы до остаточного давления не более 10–20 Па, после чего заполняли ее рабочей смесью до необходимого начального давления. После инициирования горения и по мере распространения фронта пламени от глухого торца трубы к торцу, закрытому пленкой, за счет роста давления происходил разрыв пленки и выброс продуктов сгорания в окружающее пространство.

Начальное давление смеси варьировалось от 8 до 22 кПа при комнатной температуре. Для инициирования горения применяли систему на основе стандартной автомобильной свечи с малой энергией зажигания (приблизительно 0.8 мДж).

Эксперименты проводили в стехиометрической смеси ацетилена и кислорода, разбавленной аргоном на 25%. Ацетилен в качестве горючего был выбран по нескольким причинам. С точки зрения технических приложений он является наиболее востребованным среди газообразных углеводородов. Ацетилен можно синтезировать искусственно, он поддерживает устойчивое горение в широком диапазоне составов и термодинамических условий и может быть использован как напрямую в качестве топлива, так и в виде добавки к основному топливу. Добавка ацетилена позволяет снизить эмиссию окислов азота, тем самым обеспечить экологичность рабочего цикла современных двигателей внутреннего сгорания. С другой стороны, использование ацетилена может привести к развитию детонационно-подобных режимов горения из-за его высокой химической активности. Ацетилен обладает самым высоким энергетическим потенциалом и высокой детонационной способностью в ряду других углеводородов. Механизм его воспламенения и горения считается хорошо известным и входит важной составной частью в соответствующие детальные кинетические механизмы (ДКМ) для более сложных углеводородов [74–81]. Несмотря на это, в недавних исследованиях [82] на примере сравнения экспериментальных данных с расчетами по детальному кинетическому механизму [83, 84] показано, что существующие ДКМ не всегда корректно опи-

сывают режимы высокотемпературного окисления смесей ацетилена; кроме того, актуальны вопросы редуцирования и оптимизации существующих кинетических механизмов [85].

Для фотографирования фронта пламени использовали две идентичные высокоскоростные камеры Photron Fastcam SA-Z, модель 2100 K-M-8GB (Япония). Камеры располагались перпендикулярно оси трубы последовательно одна за другой, так чтобы их поля зрения взаимно перекрывались на 10–15% для последующего совмещения ряда изображений. Скорость съемки составляла 180 тыс. кадр/с при пространственном разрешении 1024 × 88 пикселей; расстояние от объектива камеры до трубы – 850 мм, поле зрения камеры вдоль оси трубы – 650 мм. Время экспозиции каждого кадра составляло 1–1.3 мкс. Обе камеры оснащены объективами Tamron SP 24–70 мм F/2.8 Di VC USD, модель A007 и узкополосными оптическими фильтрами компании Edmund Optics (UK): BP 430 ± 10 нм, OD4, диаметром 50 мм. Полоса пропускания фильтров соответствует длине волны излучения промежуточного радикала СН. Таким образом, удавалось получить качественное изображение фронта пламени, исключив паразитную засветку от продуктов сгорания. Настройки обеих камер (время начала записи, общее время записи, разрешение кадра, скорость съемки, время экспозиции каждого кадра и т.д.) как и настройки обоих объективов и используемые светофильтры были абсолютно идентичными. Камеры были синхронизированы между собой и управлялись с использованием одного компьютера с программным обеспечением Photron Fastcam Viewer.

Анализ полученных изображений по смещению области свечения от кадра к кадру позволил определить скорость распространения фронта пламени вдоль оси трубы. С учетом незначительных (порядка нескольких пикселей) смещений (особенно при малых скоростях распространения) значения скорости рассчитывали как среднее по 5–20 кадрам. При определении скорости также учитывались эффекты, связанные с искажением изображения при наблюдении в направлении, отличном от перпендикулярного. В дальнейшем на графиках зависимостей скорости фронта пламени от расстояния или времени приводятся усредненные (интерполированные) кривые.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В рамках одной экспериментальной серии начальное давление смеси уменьшали от опорного значения 22 до 8 кПа. Это приводило к тому, что местоположение перехода горения в детонацию от

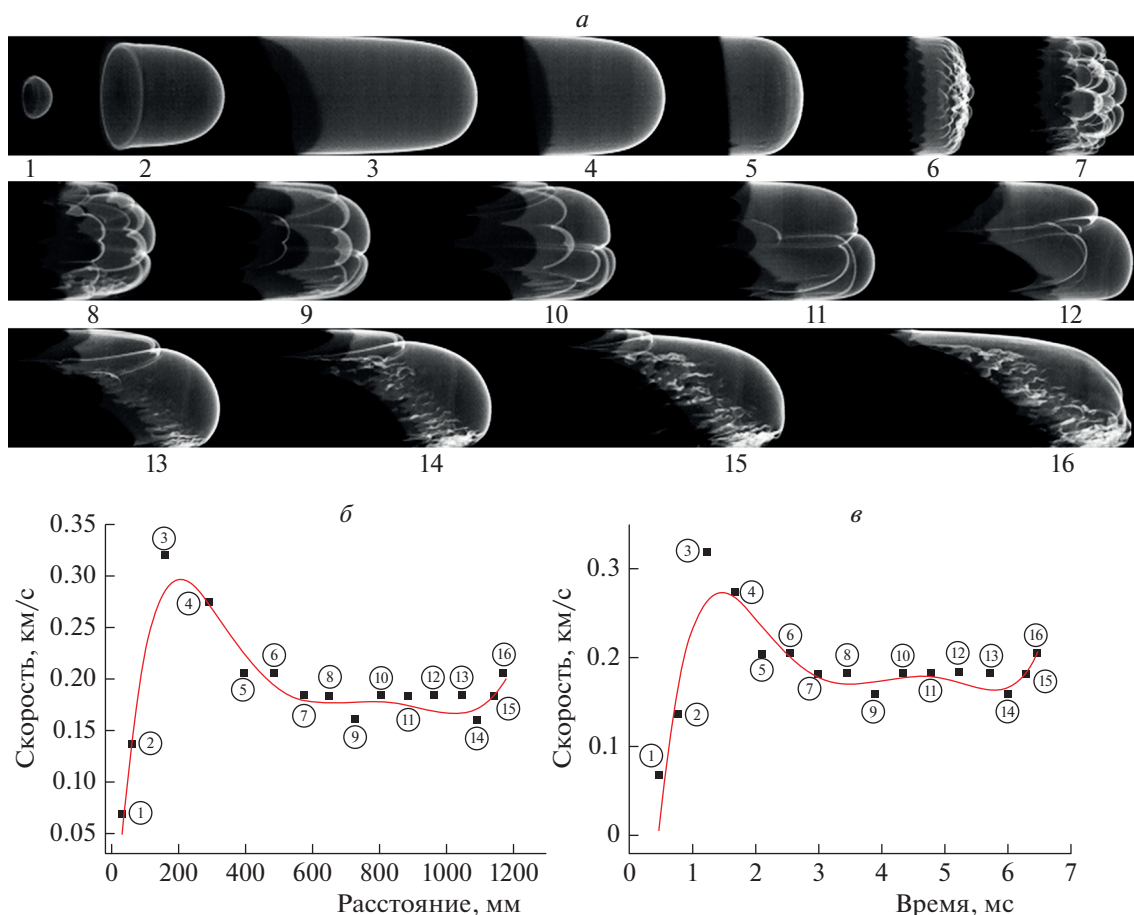


Рис. 1. Мгновенные фотографии высокоскоростной съемки свечения фронта пламени в смеси ацетилен/кислород/аргон для начального давления 8 кПа (а); поперечный размер каждого кадра (внутренний диаметр трубы) – 60 мм. Профили скорости (интерполяция по результатам обработки и усреднения массива изображений) в зависимости от расстояния (б) и времени (в). Числа на графиках указывают положения во времени соответствующих мгновенных изображений фронта пламени.

эксперимента к эксперименту смещалось вдоль трубы, а расстояние и, соответственно, время ПГД увеличивалось при уменьшении начального давления. В ряде экспериментов сам момент возникновения детонации уже не попадал в поле зрения камер, однако это давало нам возможность подробнее изучить более ранние стадии процесса ускорения пламени.

На рис. 1–5 показаны последовательные фотографии распространения волны горения при различных начальных давлениях газовой смеси. Интервал времени между представленными кадрами выбран таким образом, чтобы эволюция структуры пламени от момента зажигания до момента перехода к детонации по возможности состояла из одинакового количества кадров (15 или 16).

Кроме того, на графиках движения волны приведены измеренные по фотографиям кривые зависимостей продольной скорости передней кромки фронта пламени от расстояния либо вре-

мени. Моменты времени и расстояния вдоль оси трубы, отвечающие изображениям фронта пламени, представленным на рисунках, показаны на графиках номерами соответствующих фотографий.

Анализ изображений позволяет сделать следующие выводы. До момента формирования детонационной волны, наблюдаются четыре характерные стадии распространения пламени. На первой – фронт пламени ускоряется, затем следует стадия замедления, стадия распространения с почти постоянной скоростью и, наконец, стадия повторного ускорения, на заключительном этапе которой и формируется детонация.

Рассмотрим более подробно структуру и скорость фронта пламени на каждой стадии в отдельности. За счет выталкивающего действия продуктов сгорания, плотность которых гораздо ниже, а давление немного выше, чем в исходной смеси, газ перед фронтом волны приходит в движение,

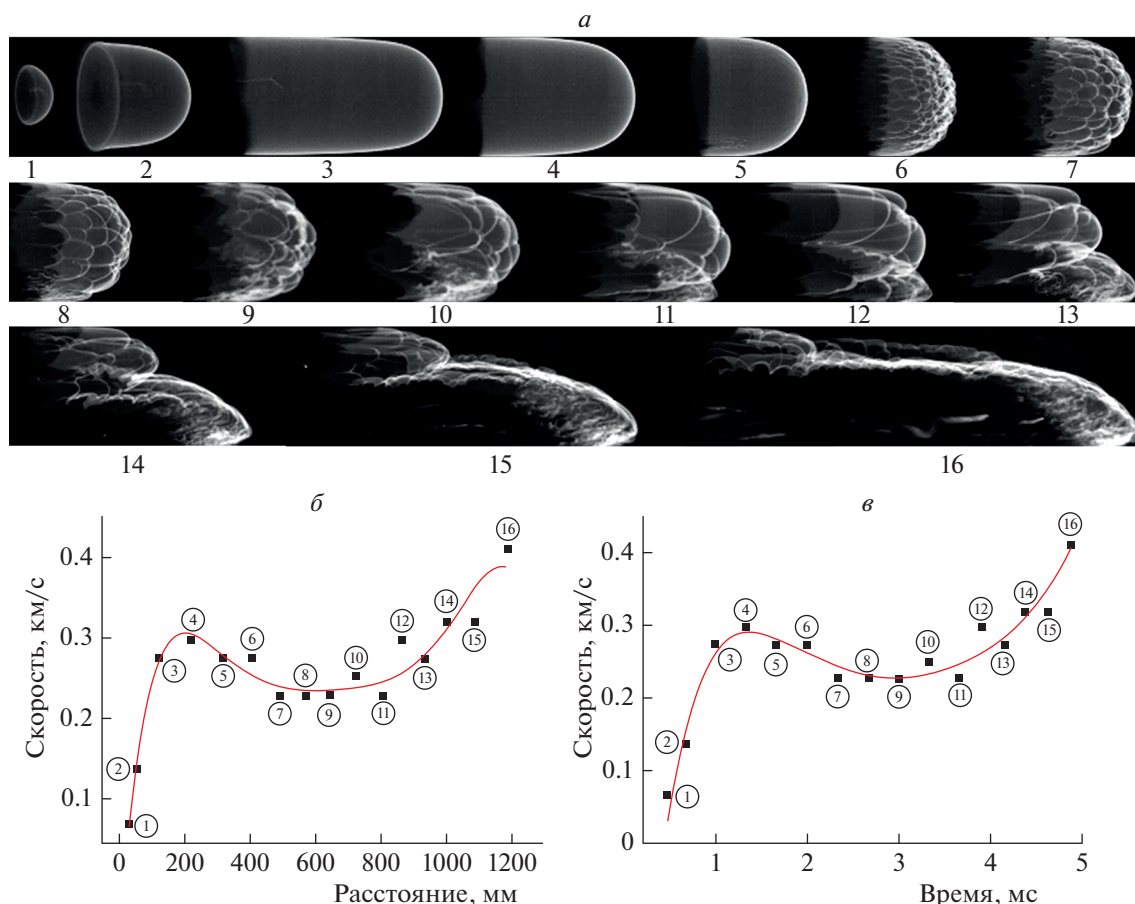


Рис. 2. То же, что и на рис. 1 для начального давления 12 кПа.

вовлекая зону реакции в движение вдоль оси трубы. В начальные моменты времени после зажигания смеси, пока пламя еще не достигло стенок трубы, его форма является практически идеальной полусферой (кадры 1 на рис. 1–5). Затем по мере достижения стенок трубы пламя начинает вытягиваться в направлении движения вдоль оси, занимая все поперечное сечение канала – формируется так называемая пальцеобразная (finger flame) форма пламени [14] (кадры 2–4, рис. 1–5). К этому моменту времени (1.5 мс от момента поджига для начального давления 8 кПа и около 1 мс для давления 20 кПа) скорость волны по отношению к наблюдателю достигает значения 300 м/с для давления 8 кПа и более 400 м/с для давления 22 кПа соответственно. К моменту достижения максимума скорости волны на первой фазе ускорения протяженность области свечения реагирующей смеси, т.е. зоны, где интенсивно протекает химическая реакция, достигает двух диаметров канала. Контуры фронта пламени – ровные и четкие, что свидетельствует о ламинарном характере горения.

На следующем этапе фронт пламени начинает замедляться. Вблизи закрытого торца трубы, т.е. в зоне зажигания, где продукты сгорания находятся максимально длительное время, возникает область разрежения, которая формирует поток газа в направлении, противоположном движению пламени. Скорость фронта пламени вдоль трубы падает с 300 до 200 м/с для давления 8 кПа, т.е. дефицит скорости составляет приблизительно 1/3 от ее максимальной величины на первой стадии ускорения (рис. 1б, в). С ростом начального давления до 22 кПа эффект торможения выражается не так ярко. Дефицит скорости волны по отношению к ее амплитуде в первом максимуме уменьшается и составляет около 10% (рис. 5б, в). Фронт пламени приобретает более плоскую форму (кадры 4–6, рис. 1–5), особенно это заметно при низком начальном давлении смеси, равном 8 кПа. Его протяженность вдоль оси трубы существенно уменьшается: с двух и более диаметров до половины диаметра трубы. Поверхность фронта пламени начинает дробиться и на ней формируется ячеистая или сотовая структура. Перед фронтом

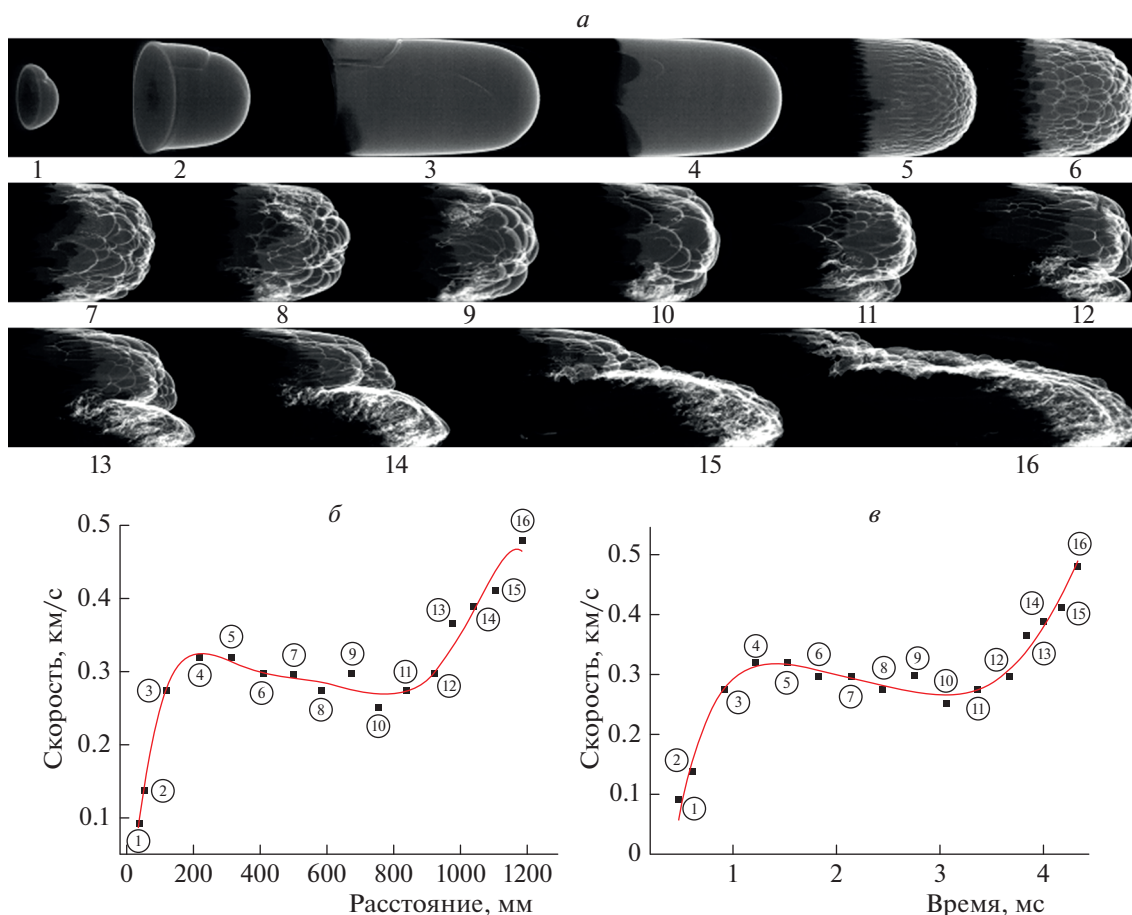


Рис. 3. То же, что и на рис. 1 для начального давления 14 кПа.

пламени наблюдается поток несгоревшего газа в направлении движения фронта, вызванный выталкивающим действием расширяющихся продуктов сгорания и возмущениями, генерируемыми пламенем и распространяющимися вниз по потоку со звуковой скоростью. За фронтом поток, вызванный волнами разрежения в продуктах сгорания, направлен в противоположную сторону. Фронт, как поверхность разрыва, подвержен газодинамической (Дарье–Ландау) и термодиффузионной (Рэля–Тейлора) неустойчивостям, что также значительно влияет на изменение формы его поверхности и ведет к появлению ячеистых структур. Размеры формирующейся структуры сильно зависят от начального давления газовой смеси и резко уменьшаются с его увеличением. Фаза замедления фронта пламени длится от момента времени 1.5 мс для давления 8 кПа и до 0.6–0.7 мс для давления 22 кПа. За этот промежуток времени фронт пламени проходит расстояния 0.4 и 0.2 м вдоль оси трубы соответственно.

За фазой замедления следует некоторый период времени, когда фронт пламени распространя-

ется с почти постоянной скоростью. Как видно из фотографий (кадры 7–14, рис. 1; кадры 7–12, рис. 2–4; кадры 7–9, рис. 5), длительность этой стадии составляет от 0.7 мс при начальном давлении 20.8 кПа до 3 мс при давлении 8 кПа. Структура и форма фронта пламени за этот период практически не претерпевают существенных изменений. Форма фронта горения близка к полусферической и вытянута вперед приблизительно на диаметр канала вдоль оси трубы. Поверхность фронта пламени имеет ярко выраженную ячеистую структуру, причем по мере движения пламени размер ячеек начинает укрупняться, а их количество сокращается. Также они начинают вытягиваться в продольном направлении вдоль оси трубы. Этот эффект наиболее ярко выражен при низких начальных давлениях.

Наконец на заключительной четвертой стадии наблюдается повторное ускорение фронта пламени. При этом его форма и структура претерпевают существенные изменения. Один из участков фронта пламени начинает резко выдвигаться вперед в направлении движения. Авторы работы [4]

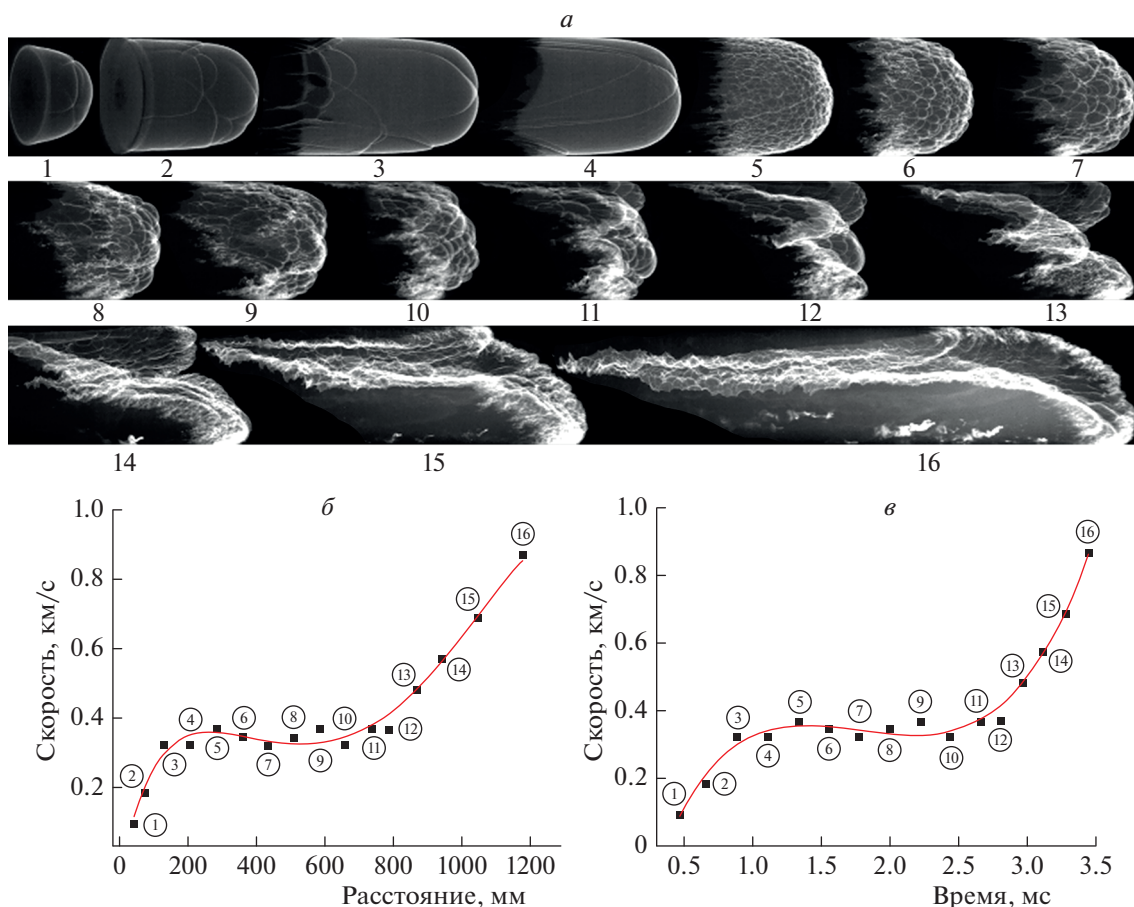


Рис. 4. То же, что и на рис. 1 для начального давления 16 кПа.

установили, что вперед выдвигается верхний участок пламени и объяснили это следующим образом: фронт пламени является границей раздела между тяжелой свежей смесью с большей плотностью и более легкими продуктами сгорания. Под действием силы тяжести тяжелая свежая смесь растекается по нижней части трубы, а более легкие продукты сгорания стремятся расположиться в верхней части, выталкивая фронт пламени вперед. Наши наблюдения показывают, что ориентация головного языка фронта пламени по отношению к периметру трубы имеет скорее случайный характер (рис. 1–5). По мере растяжения фронта пламени вдоль оси трубы происходит существенный прирост площади горения и его скорость начинает резко возрастать. Пламя принимает коническую, сильно вытянутую вдоль оси трубы форму, детально описанную в работе [82]. На кадре 15 рис. 5 при начальном давлении смеси 20.8 кПа окружностью выделено возникновение локального очага детонации в области пограничного слоя в одной из складок кромки пламени, опоясывающей стенки канала. Развитие этого очага

приводит к формированию пересжатой детонационной волны, которая распространяется вверх и вниз по потоку. В экспериментах при меньших начальных давлениях (8–16 кПа, рис. 1–4) процесс возникновения детонации уже не попадал в поле зрения системы наблюдения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом высокоскоростной визуализации исследована эволюция структуры и формы фронта пламени при горении и переходе в детонацию ацетилено-кислородной смеси в трубе цилиндрического сечения диаметром 60 мм. На фотографиях высокоскоростной съемки показаны и описаны четыре характерные стадии процесса горения газовой смеси: на первой стадии пламя ускоряется, затем следует стадия замедления, далее – стадия распространения практически с постоянной скоростью и, наконец, повторное ускорение, в ходе которого и формируется детонация. Приведены кадры характерной для каждой стадии формы пламени, определены зависимости скорости

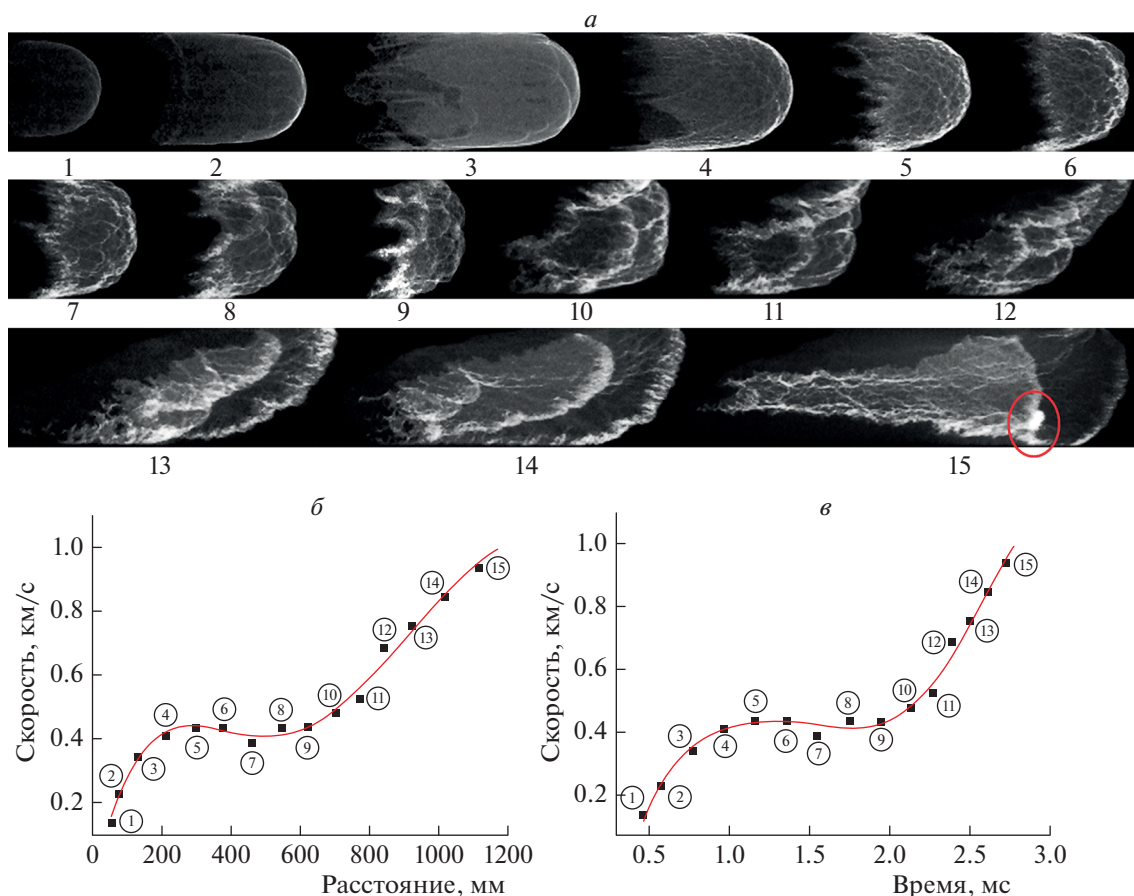


Рис. 5. То же, что и на рис. 1 для начального давления 20.8 кПа. На кадре 15 окружностью выделено возникновение локального очага детонации в области пограничного слоя.

фронта пламени вдоль оси трубы. Наиболее интересной и недостаточно изученной, на наш взгляд, является стадия повторного ускорения пламени, когда его скорость быстро возрастает от 300–400 до 1000–1200 м/с и перед фронтом пламени (или на его кромке) формируется детонационная волна. При этом в ходе развития этой стадии форма фронта пламени претерпевает резкие изменения – формируется коническая, сильно вытянутая вдоль оси трубы структура, детально описанная в работе [82]. Представленные в нашей работе новые данные выгодно отличаются от опубликованных ранее тем, что визуализация процесса для каждого начального давления смеси на всех стадиях получена в рамках одного экспериментального пуска с высокой пространственно-временной степенью детализации структуры фронта пламени.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зельдович Я.Б. Теория горения и детонации газов / Под ред. Семёнова Н.Н. М.—Л.: Изд-во АН СССР, 1944.
2. Льюис Б., Эльбе Г. Горение, пламя и взрывы в газах. Пер. с англ. Воеводского В.В. / Под ред. Франк-Каменецкого Д.А. М.: Изд-во иностр. лит., 1948.
3. Щелкин К.И. // Успехи физ. наук. 1965. Т. 87. № 2. С. 273.
4. Саламандра Г.Д., Баженова Т.В., Набоко И.М. // ЖТФ. 1959. Т. 29. № 11. С. 1354.
5. Ng H.D., Lee J.H. // J. Loss Prev. Process Ind. 2008. V. 21. № 2. P. 136.
6. Ellis O.C., Wheeler R.V. // J. Chem. Soc. 1928. P. 3215; <https://doi.org/10.1039/JR280003215>
7. Guenoche H., Jouy M. // Proc. 4th Sympos. (Intern.) on Combust. Pittsburgh: The Combust. Inst., 1953. P. 403.
8. Dunn-Rankin D., Sawyer R.E. // Proc. 10th ICDERS. Berkley, California. 1985.
9. Starke R., Roth P. // Combust. and Flame. 1986. V. 66. № 3. P. 249.
10. Dunn-Rankin D., Barr P.K., Sawyer R.F. // Proc. 21st Sympos. (Intern.) on Combust. Pittsburgh: The Combust. Inst., 1986. P. 1291.
11. Rotman D.A., Oppenheim A.K. // Ibid. P. 1303.
12. Starke R., Roth P. // Combust. and Flame. 1989. V. 75. № 1. P. 111.

13. *Gonzalez M., Borghi R., Saouab A.* // *Ibid.* 1992. V. 88. № 2. P. 201.
14. *Clanet C., Searby G.* // *Ibid.* 1996. V. 105. P. 225.
15. *Dunn-Rankin D., Sawyer R.F.* // *Exp. Fluids.* 1998. V. 24. P. 130.
16. *Xiao H.H., Sun J.H., Makarov D. et al.* // *Combust. and Flame.* 2012. V. 159. № 4. P. 1523.
17. *Xiao H., Shen X., Guo S. et al.* // *Ibid.* 2013. V. 160. № 9. P. 1725.
18. *Бабкин В.С., Козаченко Л.С.* // ПМТФ. (Новосибирск). 1960. № 3. С. 165.
19. *Солоухин Р.И.* // Там же. 1961. № 4. С. 128.
20. *Солоухин Р.И.* Ударные волны и детонация в газах. М.: Физматлит, 1963.
21. *Urtiew P.A., Oppenheim A.K.* // *Proc. R. Soc. London. Ser. A.* 1966. V. 295. P. 13.
22. *Urtiew P.A., Oppenheim A.K.* // *Proc. 11th Sympos. (Intern.) on Combust. Pittsburgh: The Combust. Inst., 1967.* P. 665.
23. *Urtiew P.A., Oppenheim A.K.* // *Proc. R. Soc. London. Ser. A.* 1968. V. 304. P. 379.
24. *Smirnov N.N., Tyurnikov M.* // *Combust. and Flame.* 1995. V. 100. № 4. P. 661.
25. *Kuznetsov M., Alekseev V., Matsukov I. et al.* // *Shock Waves.* 2005. V. 14. P. 205.
26. *Lieberman M.A., Ivanov M.F., Kiverin A.D. et al.* // *Acta Astronaut.* 2010. V. 67. P. 688.
27. *Balossier Y., Virof F., Melguizo-Gavilanes J.* // *J. Loss Prev. Process Ind.* 2021. V. 72. P. 104535.
28. *Oppenheim A.K., Soloukhin R.I.* // *Ann. Rev. Fluid Mech.* 1973. V. 5. P. 31.
29. *Zeldovich Ya.B., Librovich V.B., Makhviladze G.M. et al.* // *Acta Astronaut.* 1970. V. 15. P. 313.
30. *Zeldovich Ya.B.* // *Combust. and Flame.* 1980. V. 39. № 2. P. 211.
31. *Зельдович Я.Б.* // ЖТФ. 1947. Т. 7. № 1. С. 3.
32. *Troshin Ya.* // *Proc. 7th Sympos. (Intern.) on Combust. Pittsburgh: The Combust. Inst., 1958.* P. 789.
33. *Adams G.K., Pack D.C.* // *Ibid.* P. 812.
34. *Taki S., Fujiwara T.* // *Proc. 13th Sympos. (Intern.) on Combust. Pittsburgh: The Combust. Inst., 1971.* P. 1119.
35. *Lee J.H.S., Knystautas R., Yoshikawa N.* // *Acta Astronaut.* 1978. V. 5. P. 971.
36. *Yoshikawa N.* PhD thesis. McGill University, Dept. Mechanical Engineering. Montreal, Canada. 1980.
37. *Kurylo J., Dwyer H.A., Oppenheim A.K.* // *AIAA J.* 1980. V. 18. № 3. P. 302.
38. *Zeldovich Ya.B., Gelfand B.E., Tsyganov S.A. et al.* // *Prog. Astronaut. Aeronaut.* 1988. V. 114. P. 99.
39. *Deshaiies B., Joulin G.* // *Combust. and Flame.* 1989. V. 77. № 2. P. 201.
40. *Shepherd J.E., Lee J.H.S.* Major Research Topics in Combustion / Eds. Hussaini M.Y., Kumar A., Voigt R.G. New York: Springer, 1992.
41. *Smirnov N.N., Panfilov I.I.* // *Combust. and Flame.* 1995. V. 101. № 1–2. P. 91.
42. *Brailovsky I., Sivashinsky G.* // *Ibid.* 2000. V. 122. № 4. P. 492.
43. *Gamezo V.N., Khokhlov A.M., Oran E.S.* // *Ibid.* 2001. V. 126. № 4. P. 1810.
44. *Kagan L., Sivashinsky G.* // *Ibid.* 2003. V. 134. № 4. P. 389.
45. *Bychkov V., Akkerman V.* // *Phys Rev E.* 2006. V. 73. P. 066305.
46. *Akkerman V., Bychkov V., Petchenko A. et al.* // *Combust. and Flame.* 2006. V. 145. № 1–2. P. 206.
47. *Kagan L.* // *Math. Modell. Nat. Phenom.* 2007. V. 2. № 2. P. 40.
48. *Silvestrini M., Genova B., Parisi G. et al.* // *J. Loss Prev. Process Ind.* 2008. V. 21. № 5. P. 555.
49. *Valiev D., Bychkov V., Akkerman V. et al.* // *Phys. Lett. A.* 2008. V. 372. P. 4850.
50. *Kagan L., Sivashinsky G.* // *Combust. and Flame.* 2008. V. 154. № 1–2. P. 186.
51. *Valiev D.M., Bychkov V., Akkerman V. et al.* // *Phys. Rev. E.* 2009. V. 80. P. 036317.
52. *Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Гальбурт В.А.* // *Хим. физика.* 2009. Т. 28. № 5. С. 35.
53. *Lieberman M.A., Kuznetsov M., Ivanov A. et al.* // *Phys. Lett. A.* 2009. V. 373. P. 501.
54. *Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Либерман М.А. и др.* // *ДАН.* 2010. Т. 434. № 6. С. 756.
55. *Иванов М.Ф., Киверин А.Д.* // *Хим. физика.* 2010. Т. 29. № 2. С. 48.
56. *Ivanov M.F., Kiverin A.D., Lieberman M.A.* // *Phys. Rev. E.* 2011. V. 83. № 5. P. 056313.
57. *Ivanov M., Kiverin A., Lieberman M.* // *Intern. J. Hydrog. Energy.* 2011. V. 36. Issue 13. P. 7714.
58. *Dzieminska E., Hayashi A.* // *Ibid.* 2013. V. 38. Issue 10. P. 4185.
59. *Fukuda M., Dzieminska E., Hayashi A. et al.* // *Shock Waves.* 2013. V. 23. P. 191.
60. *Kiverin A., Yakovenko I., Ivanov M.* // *Intern. J. Hydrog. Energy.* 2016. V. 41. Issue 47. P. 22465.
61. *Kagan L., Sivashinsky G.* // *Proc. Combust. Inst.* 2017. V. 36. № 2. P. 2709.
62. *Han W., Gao Y., Law C.K.* // *Combust. and Flame.* 2017. V. 176. P. 285.
63. *Akkerman V.B.* Modeling and Simulation of Turbulent Combustion. / Eds. De S., Agarwal A., Chaudhuri S. et al. Singapor: Springer Singapor, 2018.
64. *Kiverin A., Yakovenko I.* // *Math. Modell. Nat. Phenom.* 2018. V. 13. № 6. P. 54.
65. *Bang B.H., Ahn C.S., Kim Y.T. et al.* // *Appl. Math. Model.* 2019. V. 66. P. 332.
66. *Dounia O., Vermorel O., Misdariis A. et al.* // *Combust. and Flame.* 2019. V. 200. P. 1.
67. *Киверин А.Д., Смыгалина А.Е., Яковенко И.С.* // *Хим. физика.* 2020. Т. 39. № 8. С. 9.
68. *Киверин А.Д., Тюрнин А.В., Яковенко И.С.* // *Хим. физика.* 2021. Т. 40. № 12. С. 18.
69. *Wieland C., Scharf F., Schildberg H.P. et al.* // *J. Loss Prev. Process Ind.* 2021. V. 71. P. 104504.
70. *Tang X., Dzieminska E., Hayashi A.K. et al.* // *Intern. J. Hydrog. Energy.* 2021. V. 46. Issue 75. P. 37487.
71. *Gelfand B., Frolov S., Nettleton M.* // *Prog. Energy Combust. Sci.* 1991. V. 17. № 4. P. 327.

72. *Oran E. S., Gamezo V. N.* // *Combust. and Flame.* 2007. V. 148. № 1–2. P. 4.
73. *Ciccarelli G., Dorofeev S.* // *Prog. Energy Combust. Sci.* 2008. V. 34. № 4. P. 499.
74. *Zhou C.W., Li Y., Burke U. et al.* // *Combust. and Flame.* 2018. V. 197. P. 423.
75. *Ranzi E., Frassoldati A., Grana R. et al.* // *Prog. Energy Combust. Sci.* 2012. V. 38. P. 468.
76. *Fernandez-Galisteo D., Sanchez A.L., Linan A. et al.* // *Combust. Theor. Model.* 2009. V. 3. № 4. P. 74.
77. *Tao Y., Smith G.P., Wang H.* // *Combust. and Flame.* 2018. V. 195. P. 18.
78. *Tereza A.M., Medvedev S.P., Smirnov V.N.* // *Acta Astronaut.* 2019. V. 163. P. 18.
79. *Slavinskaya N., Mirzayeva A., Whitside R. et al.* // *Combust. and Flame.* 2019. V. 210. P. 25.
80. *Tereza A.M., Medvedev S.P., Smirnov V.N.* // *Acta Astronaut.* 2021. V. 181. P. 612.
81. *Тереза А.М., Слуцкий В.Г., Северин Е.С.* // *Хим. физика.* 2009. Т. 28. № 2. С. 45.
82. *Krivosheyev P., Penyazkov O., Sakalou A.* // *Combust. and Flame.* 2020. V. 216. P. 146.
83. *Coppens F.H.V., De Ruyck J., Konnov A.A.* // *Ibid.* 2007. V. 149. № 4. P. 409.
84. *Smith G.P., Golden D.M., Frenklach M. et al.*; <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/>
85. *Тереза А.М., Агафонов Г.Л., Бетев А.С. и др.* // *Хим. физика.* 2020. Т. 39. № 12. С. 29.

**ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ**

УДК 534.222.2

**ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ДИНАМИКИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ
УДАРНОЙ ВОЛНЫ В СРЕДЕ С НЕРАВНОМЕРНЫМ
РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ПЛОТНОСТИ**© 2022 г. Я. Э. Порошина¹, А. И. Лопато¹, П. С. Уткин^{1*}¹Институт автоматизации проектирования Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: pavel_utk@mail.ru

Поступила в редакцию 10.01.2022;

после доработки 12.02.2022;

принята в печать 21.02.2022

Работа посвящена численному исследованию распространения ударной волны в среде с неравномерным распределением плотности. Математическая модель основывается на уравнениях Эйлера, которые решаются в системе координат, связанной с лидирующим скачком. Подобный подход делает возможным проведение аккуратного характеристического анализа задачи. Сначала рассмотрены задачи о распространении ударной волны в среде с участками конечной длины с линейно увеличивающейся и уменьшающейся плотностью. Проведено сравнение полученных результатов с известными аналитическими решениями. Затем рассмотрен случай непрерывного изменения плотности среды перед ударной волной по синусоидальному закону. Возникающее при этом течение описано и объяснено с использованием результатов для случая линейного градиента плотности.

Ключевые слова: математическое моделирование, ударная волна, неоднородная среда, характеристический анализ.

DOI: 10.31857/S0207401X22080106

ВВЕДЕНИЕ

В последние несколько лет наблюдается рост числа работ, посвященных задачам распространения детонационных волн в неоднородных газовых смесях. Такие задачи представляют интерес не только с точки зрения фундаментальных основ теории детонации, но и с практической точки зрения. Одно из конкретных применений — предотвращение случайного возникновения детонации в шахтах, в изолированных частях которой может накапливаться взрывоопасная смесь. В такой смеси по разным причинам возможно образование градиента концентрации топлива, что, в свою очередь, будет влиять на механизм воспламенения смеси, переход горения в детонацию и ее последующее распространение. Однако основной причиной активных исследований особенностей детонационных процессов в неоднородных газовых смесях является разработка двигателей, основанных на непрерывной вращающейся детонации [1–4]. В таких двигателях окислитель и топливо впрыскиваются в установку раздельно, что приводит к распространению детонации по сильно неоднородной смеси.

Для описания сложного процесса, происходящего в реальных установках, проводятся исследования модельных постановок, при рассмотрении

которых проясняются механизмы распространения детонации в неоднородных средах. Можно выделить следующие группы работ, в которых изучается распространение детонации в плоском канале:

- в среде с переменным продольным [5, 6] и поперечным [7–9] градиентом концентрации топлива;
- в среде с переменной плотностью смеси [10, 11];
- вдоль [12, 13] или поперек [14] инертного слоя газа;
- в рамках уравнений-аналогов [15].

Отдельно стоит отметить недавнюю работу [16], в которой изучаются соотношения вкладов следующих двух составляющих в итоговую нелинейную динамику процесса распространения детонационной волны в неоднородной среде: первая — связана с пульсирующей природой детонационной волны как таковой, проявляющейся и в однородной среде; вторая — обусловлена периодическим изменением параметров перед фронтом лидирующей ударной волны (ЛУВ). Обнаружено, что в зависимости от параметров задачи может происходить как усиление колебаний параметров за фронтом детонационной волны, так

и, наоборот, их стабилизация по сравнению со случаем однородной среды.

В наших предыдущих работах [17, 18] были построены вычислительные алгоритмы для моделирования детонации в системе координат, связанной с лидирующим фронтом (СКФ) волны детонации, в рамках одно- [17] и двухстадийной [18] моделей кинетики химических реакций. Суммируем кратко основные достоинства и недостатки расчетов детонации в СКФ [18]. В подобной постановке, с одной стороны, осуществляется переход в неинерциальную систему координат, поскольку скорость лидирующего скачка зависит от времени. Это приводит к преобразованию привычных уравнений Эйлера, составляющих основу математической модели – в них начинает фигурировать априори неизвестная скорость лидирующего скачка, для нахождения которой необходимо использовать те или иные дополнительные соображения [19–21]. Неинерциальность системы координат и необходимость рассмотрения дополнительных уравнений для скорости волны определяют большую сложность подобного подхода с точки зрения его программной реализации по сравнению с численным решением уравнений Эйлера в неподвижной, лабораторной системе координат. С другой стороны, рассмотрение задачи в СКФ имеет три основных достоинства.

Во-первых, данный подход требует существенно меньше вычислительных затрат по сравнению с традиционным рассмотрением задачи инициирования и распространения детонации в лабораторной системе координат (см., например, [22]). Здесь расчетная область физически соответствует на части или полному по длине каналу, в котором рассматривается распространение детонационной волны, а всегда некоторой области непосредственно за фронтом ЛУВ.

Во-вторых, данный подход позволяет точно фиксировать параметры непосредственно за фронтом ЛУВ. Ударная волна является фиксированной границей расчетной области и не испытывает численного “размазывания”, что неизбежно происходит в методах сквозного счета.

В-третьих, СКФ гораздо больше подходит для характеристического анализа поля течения за фронтом детонационной волны [23]. Характеристический анализ, в отличие от анализа только полей давления, плотности, массовой доли реагента, скорости газа, который обычно проводится для иллюстрации динамики распространения детонации, способен дать объяснение наблюдающихся режимов течения. Так, в работе [19] подобный анализ позволил обобщить понятие звуковой точки из теории Чепмена–Жуге для случая нестационарной пульсирующей волны детонации. Более того, реализующиеся пульсирующие режимы течения можно объяснить и с количе-

ственной точки зрения, анализируя поведение характеристик, как это сделано в работах [18, 23].

Эти факторы стимулируют расчеты распространения детонационной волны в неоднородной газовой смеси в системе координат фронта лидирующего скачка. При построении такого алгоритма необходимо разработать соответствующие вычислительные алгоритмы расчета распространения ударной волны (УВ) в неоднородной среде.

Целями настоящей работы являются:

- разработка вычислительного алгоритма для моделирования распространения УВ в среде с возмущением плотности в СКФ;
- проведение с использованием разработанного алгоритма характеристического анализа динамики распространения УВ в среде с линейным (задача, рассмотренная в работах Чиснелла и Уизема [24, 25]) и синусоидальным распределением плотности (задача Шу–Ошера [26]).

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Математическая модель основывается на уравнениях Эйлера, дополненных уравнением состояния идеального газа и записанных в векторной форме в системе координат (x, t) , связанной с фронтом ЛУВ:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{f} - D\mathbf{u}) = 0, \quad x = x' - \int_0^t D(\tau) d\tau,$$

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho v \\ e \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ (p + e)v \end{bmatrix}, \quad (1)$$

$$e = \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho v^2, \quad \varepsilon = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)}.$$

Здесь ρ – плотность газа, v – скорость газа в лабораторной системе координат (x', t) , D – скорость УВ, p – давление газа, e – полная энергия газа на единицу объема, ε – удельная внутренняя энергия газа, γ – фиксированное значение показателя адиабаты, которое во всех расчетах принималось равным 1.4. Эффектами вязкости, молекулярной диффузии и теплопроводности пренебрегаем. Отметим, что скорость газа v в системе уравнений (1) связана со скоростью ЛУВ посредством следующего уравнения:

$$v = u + D,$$

где u – скорость газа в СКФ. Второе из системы уравнений (1), уравнение импульса, записанное через скорость u , будет выглядеть следующим образом:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \quad (2)$$

что совпадает с классическим результатом из работы [27]. Уравнение (2) отличается от привычного уравнения Эйлера добавлением силы инерции dD/dt .

Для определения скорости ударной волны в СКФ определяющая система уравнений (1) записывается в характеристической форме вдоль C_+ -характеристики:

$$\begin{cases} \frac{dp}{dt} + \rho c \frac{dv}{dt} = 0, \\ \frac{dx}{dt} = v + c - D, \\ \rho_0 = \rho_0(t), \quad p_0 = p_0(t), \quad v_0 = v_0(t), \end{cases} \quad (3)$$

где в первом уравнении системы через d/dt обозначена материальная производная вдоль C_+ -характеристики, c – скорость звука. Нижним индексом “0” обозначены параметры перед фронтом ЛУВ. В лабораторной системе координат это – известные функции пространственной координаты, а в рассматриваемой постановке в СКФ – известные функции времени. В рамках настоящей работы

$$\rho_0 = \rho_0 \left(x_0 + \int_0^t D(\tau) d\tau \right), \quad p_0 = \text{const}, \quad v_0 = \text{const}. \quad (4)$$

Через x_0 обозначена начальная координата УВ.

Возможность определения скорости ЛУВ при рассмотрении системы (3) обусловлена результатами работы [19], в которой изучалась динамика распространения детонационной волны в однородной среде, т.е. в случае $\rho_0 = \text{const}$. Конкретная разностная реализация, приводящая к выражению для текущей скорости ЛУВ, приведена ниже в разделе с вычислительным алгоритмом.

Определяющая система уравнений решается на фиксированном отрезке $[-H; 0]$. Правая граница соответствует фронту ЛУВ. На ней выставляются граничные условия, определяемые соотношениями Ренкина–Гюгоньо (Rankine–Hugoniot) на скачке, движущемся с текущей скоростью D , которая находится в результате решения системы уравнений (3), (4) (см. следующий раздел). Длина расчетной области H выбиралась достаточно большой, чтобы для рассматриваемых задач левая граница области не влияла на динамику движения фронта ЛУВ. Формально левая граница области считалась свободной, использовались граничные условия экстраполяции нулевого порядка.

В качестве начальных условий во всей расчетной области задаются одинаковые параметры за фронтом ударной волны с числом Маха M , которая в начальный момент времени начинает взаи-

модействовать с пространственной неоднородностью плотности на пути ее распространения:

$$\begin{aligned} p_s &= p_0 + p_0 \frac{2\gamma(M^2 - 1)}{(\gamma + 1)}, \quad \rho_s = \frac{\rho_0(x_0)(\gamma + 1)M^2}{(\gamma - 1)M^2 + 2}, \\ v_s &= \frac{2(M^2 - 1)}{(\gamma + 1)M} \left(\frac{\gamma p_0}{\rho_0(x_0)} \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (5)$$

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ

Расчетная область покрывается равномерной расчетной сеткой. Расчетные ячейки нумеруются от 1 до N . Для численного интегрирования системы уравнений (1) используются конечно-объемная дискретизация конвективной части и явная схема Эйлера интегрирования по времени. Параметры на гранях ячеек определяются в результате кусочно-линейной реконструкции вектора консервативных переменных с помощью ограничителя `minmod`. Шаг интегрирования по времени выбирается динамически для обеспечения устойчивости на выбранной сетке. Численный поток, который рассчитывается по сеточно-характеристическому варианту схемы Куранта–Изааксона–Рис (Courant–Isaakson–Rees) [28] учитывает неявным образом скорость УВ. В этой части решения уравнений газовой динамики без учета протекания химических реакций алгоритм не отличается от методики, подробно описанной в работах [17, 18].

Основное отличие от предыдущих работ в части вычислительного алгоритма связано со способом интегрирования уравнений для нахождения скорости ЛУВ, так как параметры среды перед УВ теперь неоднородны. Дискретизация системы уравнений (3), (4) выглядит следующим образом [19]:

$$\begin{cases} p_s^{n+1} - p_*^n + \frac{1}{2} \left((\rho c)_*^n + (\rho c)_s^{n+1} \right) (v_s^{n+1} - v_*^n) = 0, \\ -x_*^n = \left(c_*^n + v_*^n - D^n \right) \Delta t^n, \\ \rho_0^{n+1} = \rho_0 \left[x_0 + L^n + \left(\frac{\gamma p_0^{n+1}}{\rho_0^{n+1}} \right)^{1/2} M^{n+1} \Delta t^n \right]. \end{cases} \quad (6)$$

Нижним индексом “s” обозначим параметры на скачке при $x_s = 0$, индексом “*” – параметры в точке пересечения C_+ -характеристики с осью x (см. рис. 1). Через L^n обозначен путь, пройденный ЛУВ на момент времени t^n :

$$L^n = \sum_{j=0}^n D^j \Delta t^j.$$

Параметры с индексом “*” находятся с помощью линейной интерполяции по известным па-

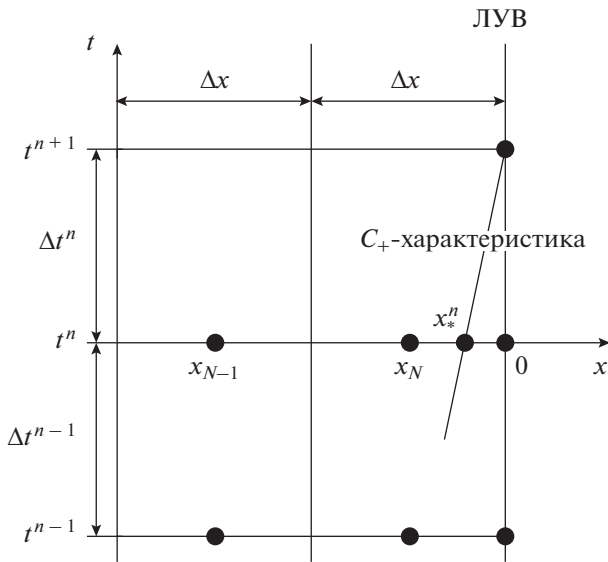


Рис. 1. Сеточный шаблон разностной схемы для расчета скорости ЛУВ.

параметрам в точках $x_N = -\Delta x/2$ (центр последней ячейки в расчетной области) и $x_s = 0$ и имеют вид

$$p_*^n = p_s^n + \frac{x_*^n}{\Delta x/2}(p_s^n - p_N^n), \quad v_*^n = v_s^n + \frac{x_*^n}{\Delta x/2}(v_s^n - v_N^n),$$

$$\rho_*^n = \rho_s^n + \frac{x_*^n}{\Delta x/2}(\rho_s^n - \rho_N^n), \quad c_*^n = \left(\gamma \frac{p_*^n}{\rho_*^n}\right)^{1/2}. \quad (7)$$

Из второго уравнения системы (6) следует выражение для координаты точки пересечения C_+ -характеристики с осью x :

$$x_*^n = -\frac{(c_s^n + v_s^n - D^n)\Delta t^n}{1 + \frac{2\Delta t^n}{\Delta x}(c_s^n - c_N^n + v_s^n - v_N^n)}. \quad (8)$$

Параметры в точке $x_s = 0$ в момент времени $t = t^{n+1}$ определяются из соотношений Ренкина–Гюгонио, аналогичным параметрам (5) как

$$p_s^{n+1} = p_0 \left(1 + \frac{2\gamma((M^{n+1})^2 - 1)}{\gamma + 1}\right),$$

$$\rho_s^{n+1} = \rho_0^{n+1} \frac{(\gamma + 1)(M^{n+1})^2}{(\gamma - 1)(M^{n+1})^2 + 2}, \quad (9)$$

$$v_s^{n+1} = c_s^{n+1} \frac{2((M^{n+1})^2 - 1)}{(\gamma + 1)(M^{n+1})^2}, \quad c_s^{n+1} = \left(\gamma \frac{p_s^{n+1}}{\rho_s^{n+1}}\right)^{1/2}.$$

Подстановка выражений (7)–(9) в (6) приводит к системе из двух нелинейных алгебраических уравнений относительно неизвестных параметров M^{n+1} и ρ_0^{n+1} , которая решается численно методом Ньютона. Граничные условия реализуются путем задания параметров в фиктивных ячейках. Для расчета потоков через левую и правую грани расчетной области вводятся фиктивные ячейки с индексами “ $m = -1$ ” и “ $m = N$ ”. На левой границе расчетной области применяется экстраполяция нулевого порядка:

$$\mathbf{u}_{-1}^n = \mathbf{u}_0^n.$$

На правой границе параметры в фиктивной ячейке равняются текущим параметрам за фронтом ЛУВ:

$$\rho_N^n = \rho_s^n, \quad v_N^n = v_s^n, \quad p_N^n = p_s^n.$$

РАСПРОСТРАНЕНИЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В СРЕДЕ С ЛИНЕЙНЫМ ГРАДИЕНТОМ ПЛОТНОСТИ

Перед рассмотрением задачи о распространении УВ в среде с синусоидальным распределением плотности рассмотрим сначала более простую задачу, когда плотность перед УВ меняется линейно – увеличивается или уменьшается. Во-первых, для данной задачи существуют аналитические оценки решения. Во-вторых, можно провести наглядную качественную аналогию между гладким синусоидальным профилем плотности и кусочно-линейным профилем с чередующимися участками увеличения и уменьшения плотности.

Задача о распространении УВ в среде с линейным градиентом плотности изучалась многими авторами. Аналогично задаче о взаимодействии УВ с единичным контактным разрывом [29], при взаимодействии УВ с градиентом плотности формируются контактные разрывы и волны разрежения или сжатия (в зависимости от знака градиента). Волны разрежения или сжатия взаимодействуют с контактными разрывами с образованием переотраженных волн, которые также влияют на динамику движения ЛУВ. В работе [30] с использованием численного анализа проводилось исследование влияния переотраженных волн на фронт ЛУВ в зависимости от различных факторов, таких как: число Маха волны, абсолютное значение и знак градиента плотности, а также вид профиля плотности (линейное изменение или по степенному закону). Выводы были основаны на сравнении численных результатов с аналитическим решением Чиселла–Уизема [24, 25] (см. Приложение 1). Одно из основных предположений при построении аналитического решения Чиселла–Уизема – отсутствие влияния переотраженных волн на фронт ЛУВ. Отметим, что аналитические оценки параметров течения в ударно-

волновых задачах представляют и самостоятельный интерес, например, в задачах распространения ударных волн в двухфазных средах [31–33] и в каналах сложной формы [34].

Расчетная область – отрезок $[-10;0]$. Значения начальной плотности, скорости и давления во всей расчетной области соответствуют параметрам за УВ с числом $M = 3.0$. Перед фронтом ЛУВ находится покоящийся газ при давлении $p_0 = 1.0$. На участке конечной длины, равной 1.0 плотность газа меняется по линейному закону:

$$\rho_0(t) = \begin{cases} a \int_0^t D(\tau) d\tau + b, & \text{если } \int_0^t D(\tau) d\tau < 1.0, \\ a + b, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (10)$$

Для случая линейно растущей плотности газа перед фронтом ЛУВ $a = 7.0$, $b = 1.0$. Для случая линейно падающей плотности $a = -7.0$, $b = 8.0$. Числовые параметры постановки взяты из работ [30] (закон изменения плотности (10) и конкретные значения a и b) и [26] (интенсивность УВ). Здесь и далее все параметры приведены в безразмерном виде. Расчеты проводились на сетке с числом ячеек $N = 2000$.

Рассмотрим сначала случай линейно растущего градиента плотности. Ударная волна преодолевает участок с неоднородной плотностью за время $t_A \approx 0.43$ (см. рис. 2 и 3). Процедура построения характеристик описана в *Приложении 2*. В течение этого периода времени за фронтом ЛУВ генерируются волны сжатия и контактные разрывы. При этом скорость ЛУВ падает, а число Маха увеличивается. Как до, так и после момента времени t_A аналитическое решение Чиснелла–Уизема (кривая 4 на рис. 3), не учитывающее влияние переотраженных волн на ЛУВ, сильно отличается от численного решения (кривая 2 на рис. 3). Отметим, что в работе [35] представлена модификация аналитической теории Чиснелла–Уизема для возможности учета влияния переотраженных волн на ЛУВ.

После того как плотность перед волной становится постоянной, скорость волны и число Маха уменьшаются под воздействием волн, отраженных от контактных разрывов за волной и догоняющих ЛУВ. Основные изменения продолжают до тех пор, пока волна, отраженная от контактного разрыва, следующего вдоль C_0 -характеристики, выпущенной в начальный момент времени, не догонит ЛУВ при $t_B \approx 1$. В этот момент времени число Маха ЛУВ выходит на значение, близкое асимптотической величине (прямая 5 на рис. 3). Данная асимптотика определяется решением задачи Римана (Riemann). Параметры по одну сторону от разрыва в этой задаче Римана – параметры за фронтом УВ с числом Маха, равным 3.0, со-

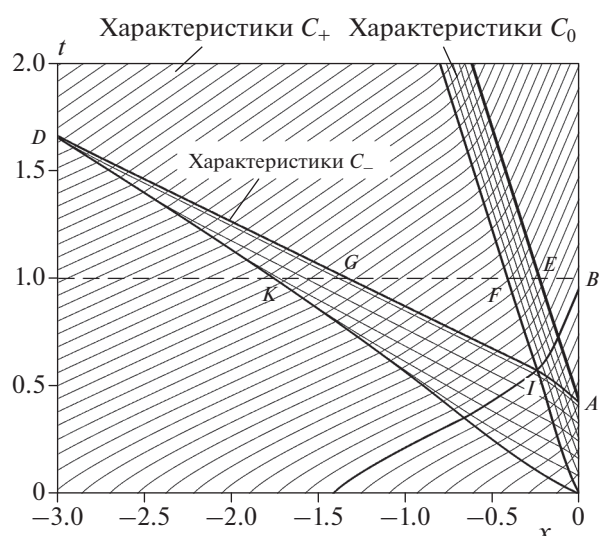


Рис. 2. Семейство характеристик в задаче о распространении УВ по участку среды конечной длины с линейно возрастающим градиентом плотности.

ответствующие начальному моменту времени, когда значение плотности перед УВ равно 1.0. Параметры справа – итоговые параметры перед УВ, соответствующие моменту времени, когда плотность перестает меняться и ее значение становится равным 8.0.

Из рис. 2 видно, что C_- -характеристики, вдоль которых следуют отраженные от ЛУВ волны сжатия, постепенно вливаются в характеристику, следующую из начала координат. По этой причине по мере распространения протяженность волны сжатия уменьшается. Например, в момент времени $t_B \approx 1$ на рис. 2 и 4 границы ее обозначены точками K и G . Контактные разрывы, формирующиеся при прохождении ЛУВ участка переменной плотности, двигаются с постоянной скоростью. Граница области контактных разрывов обозначена на рис. 2 и 4 точками E и F . Давление и скорость в области между ЛУВ и хвостом волны сжатия на промежутке времени от t_A до t_B (например, для момента времени t_B это – область $[x_G; 0]$ на рис. 4) не постоянны из-за влияния характеристик из “переотраженного характеристического треугольника”, IAB , на рис. 2. Время, в течение которого переотраженные волны продолжают влиять на ЛУВ, несмотря на то, что плотность перед УВ уже постоянна, коррелирует со временем, которое требуется пройти волне, отраженной от точки A , до точки I , а также волне, переотраженной от точки I , до точки B .

Аналогичное исследование проведено для случая уменьшающейся перед фронтом ЛУВ плотности. В этом случае УВ преодолевает участок с градиентом плотности за время ≈ 0.66 . Вместо волн

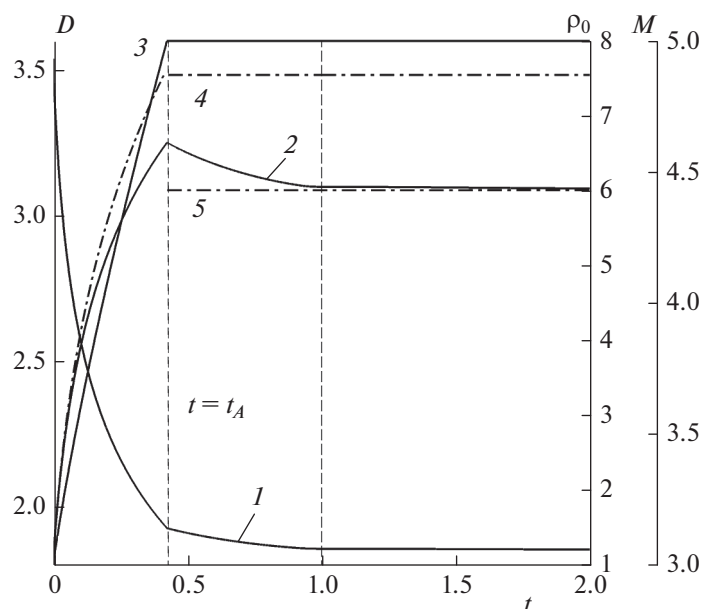


Рис. 3. Динамика изменения скорости (кривая 1) и числа Маха ЛУВ (кривая 2) в задаче о распространении УВ по участку среды конечной длины с линейно возрастающим градиентом плотности (кривая 3, плотность перед фронтом ЛУВ). Штрих-пунктирная кривая 4 – аналитическое решение Чиснелла–Уизема. Штрих-пунктирная прямая 5 – асимптотическое решение.

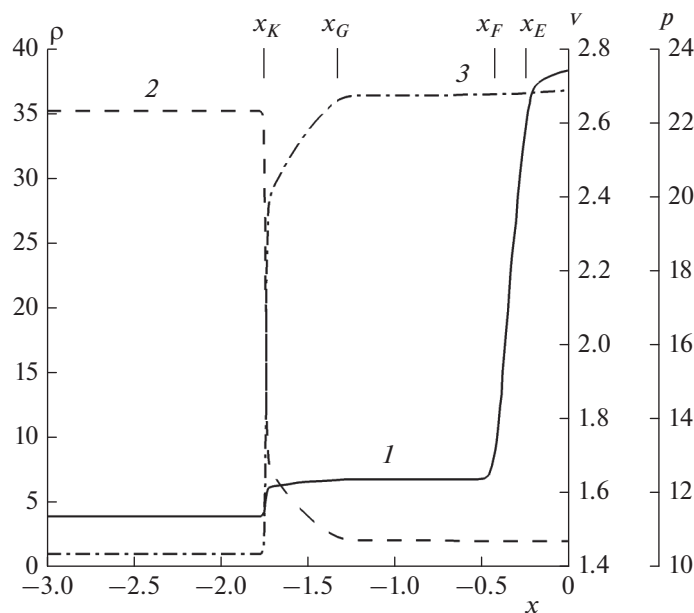


Рис. 4. Рассчитанные пространственные профили распределения за фронтом ЛУВ в задаче о распространении УВ по участку среды конечной длины с линейно возрастающим градиентом плотности в момент времени $t = 1.0$. Кривая 1 – распределение плотности, 2 – распределение скорости, 3 – распределение давления.

сжатия за фронтом ЛУВ генерируются волны разрежения. При этом, в отличие от случая с увеличивающейся плотностью перед ЛУВ, скорость ЛУВ увеличивается, а число Маха уменьшается. Также аналитическое решение Чиснелла–Уизема, не учитывающее влияние переотраженных

волн на ЛУВ, практически не отличается от численного до момента времени $t = 0.66$, когда аналитическое решение выходит на стационарный уровень. По предположению, сделанному в работе [30], это свидетельствует о том, что переотраженные волны почти не влияют на итоговое решение в этой

области. Данное предположение подкрепляется проведенным характеристическим анализом. Характеристики C_+ , вначале отклоняясь от ЛУВ, гораздо позже приходят к правой границе расчетной области, и, соответственно, их влияние на ЛУВ также начинается позже. Характеристики C_- , вдоль которых следуют отраженные от ЛУВ волны разрежения, постепенно расходятся, расстояние между ними увеличивается.

После того как плотность перед волной становится постоянной, ее скорость и число Маха увеличиваются под воздействием волн, отраженных от контактных разрывов за волной и догоняющих ЛУВ. Это продолжается до тех пор, пока последняя переотраженная волна не догонит ЛУВ в момент времени $t \approx 3.69$. К этому времени число Маха выходит на асимптотический уровень.

РАСПРОСТРАНЕНИЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В СРЕДЕ С СИНУСОИДАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ПЛОТНОСТИ

Задача о взаимодействии УВ с синусоидальным возмущением плотности была рассмотрена в статье [26] (отсюда ее название – задача Шу–Ошера) в качестве примера, иллюстрирующего свойства ENO-схем повышенного порядка точности. Со временем данная задача стала распространенным, достаточно жестким тестом для проверки реализации и свойств методов сквозного счета для решения уравнений Эйлера, так как решением задачи является течение, в поле которого содержатся и гладкие структуры, и движущиеся разрывы. По этой же причине задача Шу–Ошера часто используется для проверки методов расчета течений с волнами детонации (см., например [36, 37]), поскольку структура фронта детонационной волны включает и лидирующий скачок, и область гладкого изменения параметров за ней, которая должна очень хорошо разрешаться. Разрешение гладких областей течения возможно при использовании схем повышенного порядка точности, которые в то же время должны быть достаточно устойчивыми и не приводить к возникновению нефизических осцилляций в окрестностях газодинамических разрывов. Задача Шу–Ошера не имеет точного решения, и в качестве эталонного часто рассматривают решение из работы [26], полученное на сетке с разрешением $6.25 \cdot 10^{-3}$ методом сквозного счета третьего порядка точности.

Отметим работы [35, 38, 39], в которых для исследования распространения УВ в среде с неоднородным распределением плотности, в том числе в модельных постановках, близких задаче Шу–Ошера, использовались методы, отслеживающие фронт ЛУВ. Данные методы, в некотором смысле близкие алгоритму, который предлагается в на-

стоящей работе, базировались на аппарате подвижных сеток или представляли собой разновидности метода погруженной границы.

Расчетная область – отрезок $[-20; 0]$. Значения начальной плотности, скорости и давления во всей расчетной области соответствуют параметрам за УВ с числом $M = 3.0$. Перед фронтом ЛУВ находится покоящийся газ при давлении $p_0 = 1.0$, плотность которого меняется по закону

$$\rho_0(t) = 1 + \varepsilon \sin \left(a \int_0^t D(\tau) d\tau \right),$$

где $\varepsilon = 0.2$, $a = 5.0$. Расчеты проводились на сетке с числом ячеек $N = 4000$.

В начальный момент времени и до момента $t \approx 0.154$ плотность перед УВ увеличивается по синусоидальному закону. Как и в задаче с линейно растущей плотностью перед фронтом ЛУВ, это сопровождается образованием волн сжатия и контактных разрывов (см. рис. 5). При этом число Маха ЛУВ увеличивается, в то время как ее скорость уменьшается. Волны, отраженные от ЛУВ и следующие вдоль характеристик C_- , постепенно сливаются в одну характеристику, догоняя друг друга. Фронт волны сжатия со временем становится более крутым. В итоге этот процесс приводит к формированию внутренних ударных волн. В момент времени $t \approx 0.154$ плотность перед ЛУВ начинает уменьшаться, и, аналогично описанному ранее случаю уменьшающегося линейного градиента плотности, теперь вдоль характеристик C_- следуют волны разрежения; ЛУВ начинает ускоряться, а число Маха ее уменьшается. Далее процесс циклично повторяется по мере продвижения ударной волны по среде с переменной плотностью.

На рис. 6 показано изображение профиля плотности газа за ЛУВ в момент времени $t = 1.8$ в сравнении с профилем из работы [26]. При $-1.69 < x < 0$ график плотности имеет вид колеблющейся кривой, что связано с распространением налево контактных разрывов, отраженных от ЛУВ, а также влиянием на эту область характеристик C_+ и C_- , переотраженных внутри зоны контактных разрывов. Видно хорошее соответствие между результатом, полученным при расчете с использованием предложенного алгоритма, и эталонным результатом [26].

Некоторая неточность в фазе пиков в области контактных разрывов связана с погрешностями оцифровки результатов [26], не полной идентичностью моментов времени сравнения результатов и необходимостью совмещения графиков относительно текущего положения фронта ЛУВ для прямого сравнения результатов. Важными являются различия в амплитудах пиков, отстоящих от

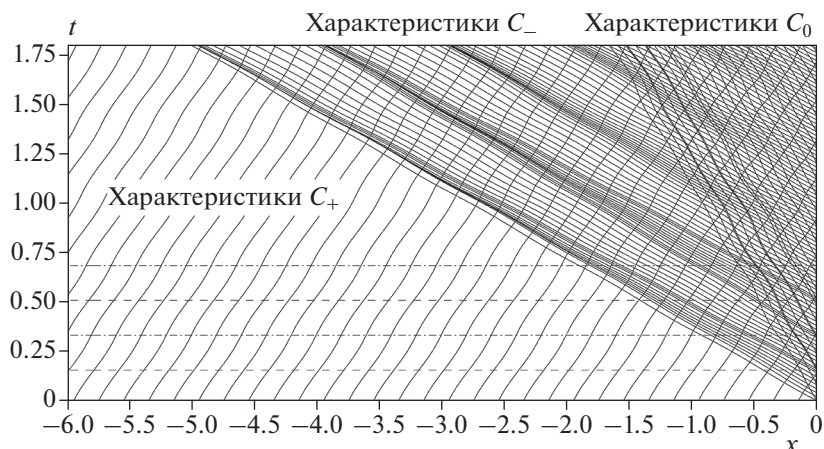


Рис. 5. Семейство характеристик в задаче Шу–Ошера. Пунктирные горизонтальные прямые обозначают моменты времени, соответствующие максимальным значениям плотности перед ЛУВ, штрих-пунктирные линии – минимальным.

фронта ЛУВ. Как показано, например, в работе [40], занижение амплитуды пиков связано с недостаточно высоким порядком точности численного метода. При использовании методов третьего и выше порядков точности соответствие данным [26] в этой части будет лучше. Специфика решения задачи в СКФ может также потребовать использования более точного алгоритма определения скорости ЛУВ. В работе [17] для этих целей использовалась локально-квадратичная аппроксимация характеристики C_+ в окрестности ЛУВ.

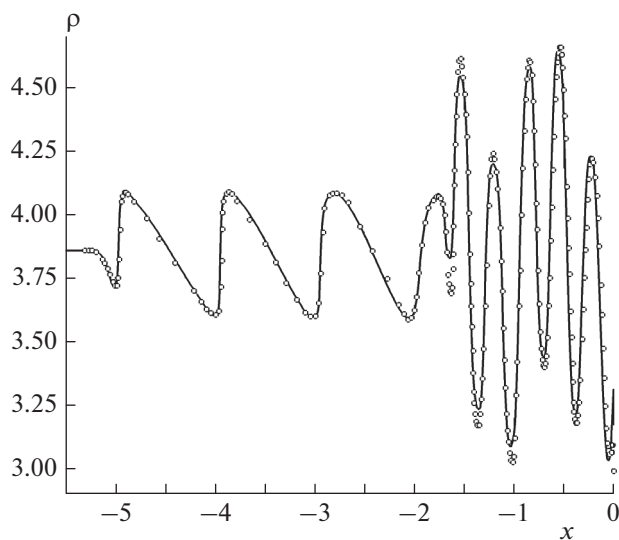


Рис. 6. Пространственные профили плотности газа за фронтом ЛУВ в задаче Шу–Ошера в момент времени $t = 1.8$. Сплошная линия – расчет авторов, точки – расчет из работы [26].

ВЫВОДЫ

1. В работе предложен алгоритм для расчета распространения ударной волны в среде с переменной плотностью в системе координат, связанной с ударной волной. С использованием работ [17, 18] описанный алгоритм может быть обобщен на случай химически реагирующих сред в рамках одно- и двухстадийной модели кинетики и применен для исследования механизмов распространения волн детонации в неоднородных средах.

2. Работоспособность вычислительного алгоритма продемонстрирована для двух типов неоднородностей перед ударной волной: участок конечной длины с линейным градиентом плотности и синусоидальное распределение плотности. Для случая линейного градиента проведено сравнение полученных результатов с аналитической теорией Чиселла–Уизема, не учитывающей влияния переотраженных волн на лидирующую ударную волну. Были получены хорошее согласование для случая уменьшающейся плотности перед ударной волной и расхождение результатов для случая увеличивающейся плотности, что связано с разной степенью влияния переотраженных волн на лидирующий скачок. Решение задачи о взаимодействии ударной волны с синусоидальным распределением плотности (задача Шу–Ошера) сравнивалось с решением, представленным в работе [26]. Получено хорошее согласование за исключением амплитуд некоторых пиков в зоне контактных разрывов. На уровне характеристик показано, что решение задачи Шу–Ошера циклически сочетает в себе элементы решения задачи об уменьшающемся и увеличивающемся линейных градиентах плотности перед волной.

3. Рассмотренные в статье задачи служат не только для валидации вычислительного алгоритма

ма. Они демонстрируют основную идею исследования в системе координат, связанной с лидирующим скачком. Подобный математический аппарат позволяет проводить качественные и количественные исследования течений с ударными и детонационными волнами с точки зрения поведения характеристик, которые раскрывают механику газодинамических процессов.

Приложение 1

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЧИСНЕЛЛА–УИЗЕМА

Приведем аналитическое решение [24, 25] задачи о взаимодействии ударной волны с неоднородной средой без учета влияния переотраженных от контактных разрывов волн. Теория Чиснелла–Уизема рассматривает область непрерывно меняющейся плотности перед волной как совокупность слоев с постоянной плотностью, разделенных элементарными контактными разрывами. В частности, в работах [24, 25] выведено соотношение, связывающее изменение плотности перед ударной волной $d\rho_0$ и ее интенсивность dz , где z – отношение давления за ударной волной к давлению перед ударной волной:

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{d\rho_0}{dz} = \frac{2}{z-1} - \frac{1}{\lambda^2 + z} + \frac{2}{z-1} \left[\frac{1 + \lambda^2 z}{z(1 + \lambda^2)} \right]^{1/2}, \quad (11)$$

где $\lambda = [(\gamma - 1)/(\gamma + 1)]^{1/2}$ – константа, γ – показатель адиабаты. Из уравнения (11) следует система обыкновенных дифференциальных уравнений, которую следует решать численно относительно неизвестных z , ρ_0 и числа M :

$$\begin{cases} \frac{dz}{dt} = \frac{1}{\rho_0} \frac{d\rho_0}{dx_s} \left(\frac{\gamma p_0}{\rho_0} \right)^{1/2} M \left\{ \frac{2}{z-1} - \frac{1}{\lambda^2 + z} + \right. \\ \left. + \frac{2}{z-1} \left[\frac{1 + \lambda^2 z}{z(1 + \lambda^2)} \right]^{1/2} \right\}^{-1}, \\ \frac{d\rho_0}{dt} = \frac{d\rho_0}{dx_s} \left\{ \frac{\gamma p_0}{\rho_0} \left[\frac{(z(t) - 1)(\gamma + 1)}{2\gamma} + 1 \right] \right\}^{1/2}, \\ \frac{dM}{dt} = \left[\frac{(z - 1)(\gamma + 1)}{2\gamma} + 1 \right]^{1/2}, \end{cases} \quad (12)$$

где x_s – траектория ударной волны, p_0 – постоянное давление перед ударной волной. Производная $d\rho_0/dx_s$ определяет заданное пространственное распределение плотности среды перед ударной волной. Например, если плотность перед ударной волной задается линейным законом:

$$\rho_0 = \begin{cases} ax_s + b, & 0 \leq x_s \leq 1, \\ a + b, & x_s > 1, \end{cases} \quad a = \text{const}, \quad b = \text{const},$$

то соответствующая производная будет записываться следующим образом:

$$\frac{d\rho_0}{dx_s} = \begin{cases} a, & 0 \leq x_s \leq 1, \\ 0, & x_s > 1. \end{cases}$$

Система уравнений (12) решалась явным методом Эйлера:

$$\begin{cases} z_{k+1} = z_k + \Delta t \frac{1}{\rho_{0k}} \frac{d\rho_0}{dx_s} \left(\frac{\gamma p_0}{\rho_{0k}} \right)^{1/2} M_k \left\{ \frac{2}{z_k - 1} - \right. \\ \left. - \frac{1}{\lambda^2 + z_k} + \frac{2}{z_k - 1} \left[\frac{1 + \lambda^2 z_k}{z_k(1 + \lambda^2)} \right]^{1/2} \right\}^{-1}, \\ \rho_{0k+1} = \rho_{0k} + \Delta t \frac{d\rho_0}{dx_s} \left\{ \frac{\gamma p_0}{\rho_{0k}} \left[\frac{(z_k - 1)(\gamma + 1)}{2\gamma} + 1 \right] \right\}^{1/2}, \\ M_{k+1} = M_k + \Delta t \left[\frac{(z_k - 1)(\gamma + 1)}{2\gamma} + 1 \right]^{1/2}, \end{cases}$$

где нижний индекс “ k ” обозначает значение искомого параметра в момент времени $t_k = t_{k-1} + \Delta t$, а Δt – шаг интегрирования.

Приложение 2

ПОСТРОЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК

Для построения характеристик C_+ , C_- и C_0 на рис. 2 и 5 решались следующие уравнения:

$$\begin{cases} \frac{dx_{\pm}}{dt} = v_{\pm} + c_{\pm} - D, \\ \frac{dx_{-}}{dt} = v_{-} - c_{-} - D, \\ \frac{dx_0}{dt} = v_0 - D, \end{cases}$$

где индекс “ i ” = +, –, 0, указывает на принадлежность параметров к семейству характеристик C_i . Данные уравнения решаются численно с помощью явной схемы Эйлера:

$$\begin{cases} x_{+}^{n+1} = x_{+}^n + \Delta t^n (v_{+}^n + c_{+}^n - D^n), \\ x_{-}^{n+1} = x_{-}^n + \Delta t^n (v_{-}^n - c_{-}^n - D^n), \\ x_0^{n+1} = x_0^n + \Delta t^n (v_0^n - D^n), \end{cases}$$

где индекс “ n ” обозначает номер текущего шага по времени. Скорость газа и скорость звука в точках x_i^n определяются с помощью линейной интерполяции по параметрам в центрах ячеек между которыми попадает характеристика:

$$\begin{cases} v_i^n = v_m^n + \frac{v_{m+1}^n - v_m^n}{\Delta x} (x_i^n - x_m), & x_m \leq x_i^n \leq x_{m+1}, \\ c_i^n = c_m^n + \frac{c_{m+1}^n - c_m^n}{\Delta x} (x_i^n - x_m), & x_m \leq x_i^n \leq x_{m+1}. \end{cases}$$

Для рассматриваемых в статье задач характеристики C_+ направлены к правой границе расчетной области, т.е. к ЛУВ. Остальные характеристики имеют противоположный наклон. Уравнения для характеристик C_+ решаются, пока $x_+^n \leq 0$, т.е. пока характеристики не приблизятся к правой границе расчетной области. Уравнения для характеристик C_- и C_0 решаются, пока $x_-^n > -H$ и $x_0^n > -H$ соответственно, т.е. пока характеристики не выйдут за пределы расчетной области слева.

Все характеристики C_+ выпускались из точек на оси $t = 0$, находящихся на равном расстоянии друг от друга. Характеристики C_- и C_0 выпускались из точек на оси $x = 0$, также находящихся на равном расстоянии друг от друга.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wolanski P. // Shock Waves. 2021. V. 31. № 7. P. 623; <https://doi.org/10.1007/s00193-021-01038-2>
2. Bykovskii F.A., Zhdan S.A., Vedernikov E.F. et al. // Ibid. Issue 8. P. 829; <https://doi.org/10.1007/s00193-021-01044-4>
3. Matsuoka K., Tanaka M., Noda T. et al. // Combust. and Flame. 2020. V. 225. P. 13; <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.10.048>
4. Фролов С.М., Иванов В.С. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 4. С. 68; <https://doi.org/10.31857/S0207401X21040075>
5. Honhar P., Kaplan C.R., Houim R.W. et al. // Combust. and Flame. 2020. V. 222. P. 152; <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.08.034>
6. Ma W.J., Wang C., Han W.H. // Shock Waves. 2020. V. 30. P. 703; <https://doi.org/10.1007/s00193-020-00976-7>
7. Kessler D.A., Gamezo V.N., Oran E.S. // Philos. Trans. R. Soc. B. London, Ser., 2012. V. 370. P. 567; <https://doi.org/10.1098/rsta.2011.0342>
8. Boeck L.R., Berger F.M., Hasslberger J. et al. // Shock Waves. 2016. V. 26. P. 181; <https://doi.org/10.1007/s00193-015-0598-8>
9. Han W., Wang C., Law C.C. // J. Fluid Mech. 2019. V. 865. P. 602; <https://doi.org/10.1017/jfm.2019.37>
10. Chue R.S., Lee J.H., Zhang F. // Shock Waves. 1995. V. 5. P. 159; <https://doi.org/10.1007/BF01435523>
11. Kim M., Mi X., Kiyanda C.B. et al. // Proc. Combust. Inst. 2021. V. 38. P. 3701; <https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.07.138>
12. Mi X.C., Higgins A.J., Kiyanda C.B. et al. // Shock Waves. 2018. V. 28. P. 993; <https://doi.org/10.1007/s00193-018-0847-8>
13. Taileb S., Melguizo-Gavilanes J., Chinnayya A. // Combust. and Flame. 2020. V. 218. P. 247; <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.04.018>
14. Tropin D., Bedarev I. // J. Loss Prev. Process. Ind. 2021. V. 72. P. 104595; <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2021.104595>
15. Kasimov A.R., Gonchar A.R. // Proc. Comb. Inst. 2021. V. 38. Issue 3. P. 3725; <https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.07.149>
16. Kasimov A.R., Goldin A.Yu. // Shock Waves. 2021; <https://doi.org/10.1007/s00193-021-01049-z>
17. Lopato A.I., Utkin P.S. // Combust. Sci. Technol. 2016. V. 188. № 11–12. P. 1844; <https://doi.org/10.1080/00102202.2016.1212570>
18. Poroshyna Y.E., Lopato A.I., Utkin P.S. // J. Inverse Ill-Posed Probl. 2021. V. 29. № 4. P. 557; <https://doi.org/10.1515/jiip-2020-0032>
19. Kasimov A.R., Stewart D.S. // Phys. Fluids. 2004. V. 16. P. 3566; <https://doi.org/10.1063/1.1776531>
20. Henrick A.K., Aslam T.D., Powers J.M. // J. Comput. Phys. 2006. V. 213. P. 311; <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.08.013>
21. Romick C.M., Aslam T.D. // Ibid. 2019. V. 395. P. 765; <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.06.011>
22. Киверин А.Д., Смыгина А.Е., Яковенко И.С. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 8. С. 9; <https://doi.org/10.31857/S0207401X2008004X>
23. Leung C., Radulescu M.I., Sharpe G.J. // Phys. Fluids. 2010. V. 22. Paper 126101; <https://doi.org/10.1063/1.3520188>
24. Chisnell R.F. // Proc. R. Soc. A. London, Ser., 1955. V. 232. № 1190. P. 350; <https://doi.org/10.1098/rspa.1955.0223>
25. Whitham G.B. // J. Fluid Mech. 1958. V. 4. P. 337; <https://doi.org/10.1017/S0022112058000495>
26. Shu C.-W., Osher S. // J. Comput. Phys. 1989. V. 83. P. 32; [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(89\)90222-2](https://doi.org/10.1016/0021-9991(89)90222-2)
27. Кочин Н.Е., Кибель И.А., Розе Н.В. Теоретическая гидромеханика. М.: ГИФМЛ, 1963. Ч. 1.
28. Холодов А.С. // Журн. вычислительной математики и мат. физики. 1978. Т. 18. № 6. С. 1476.
29. Овсянников Л.В. Лекции по основам газовой динамики. 2-е изд., доп. Москва–Ижевск: Ин-т компьютерных исслед., 2003.
30. Bird G.A. // J. Fluid Mech. 1961. V. 11. № 2. P. 180; <https://doi.org/10.1017/S0022112061000457>
31. Медведев С.П., Фролов С.М., Гельфанд Б.Е. // Инж.-физ. журн. 1990. Т. 58. № 6. С. 924.
32. Медведев С.П., Андержанов Э.К., Гук И.В. и др. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 12. С. 24; <https://doi.org/10.31857/S0207401X20120110>

33. Хомик С.В., Гук И.В., Иванцов А.Н. и др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 8. С. 63;
<https://doi.org/10.31857/S0207401X21080045>
34. Шаргатов В.А., Чугайнова А.П., Горкунов С.В. и др. // Тр. МИАН. 2018. Т. 300. С. 216.
35. Tian Y., Jaber F.A., Livescu D. // Proc. AIAA SciTech Forum. 2020. Orlando, FL, USA;
<https://doi.org/10.2514/6.2020-0101>
36. Cole L.K., Karagozian A.R., Cambier J.-L. // Combust. Sci. Technol. 2012. V. 184. P. 1502;
<https://doi.org/10.1080/00102202.2012.690316>
37. Dong H., Fu L., Zhang F. et al. // Commun. Comput. Phys. 2019. V. 25. P. 1357;
<https://doi.org/10.4208/cicp.OA-2018-0008>
38. Suresh A. // J. Comput. Phys. 2005. V. 206. P. 6;
<https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.11.036>
39. Rawat P.S., Zhong X. // Ibid. 2010. V. 229. № 19. P. 6744;
<https://doi.org/10.1016/j.jcp.2010.05.021>
40. Лопато А.И., Уткин П.С. // Компьютерные исслед. и моделирование (Ижевск). 2014. Т. 6. № 5. С. 643;
<https://doi.org/10.20537/2076-7633-2014-6-5-643-653>

**ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ**

УДК 544.452:544.427

**ИССЛЕДОВАНИЕ ГОРЕНИЯ СЛОЕВЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ
СРЕД С УЧЕТОМ ДИФфуЗИОННОГО СМЕШЕНИЯ РЕАГЕНТОВ**© 2022 г. С. А. Рогачев¹, К. Г. Шкадинский², П. М. Кришеник^{1*}¹*Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мерджанова
Российской академии наук, Черноголовка, Россия*²*Институт проблем химической физики Российской академии наук, Черноголовка, Россия*

*E-mail: petr@ism.ac.ru

Поступила в редакцию 08.07.2021;

после доработки 08.09.2021;

принята в печать 20.09.2021

Предложена математическая модель для анализа распространения волны безгазового горения вдоль границы контакта конденсированных слоев с учетом плавления и кристаллизации слоев. Исследовано влияние процессов диффузионного смешения химически активных реагентов, толщины слоев и теплопотерь на распространение и структуру фронта горения. Проведен анализ автоколебательного распространения волны в двухслойной системе вдоль границы контакта.

Ключевые слова: безгазовое горение, двухслойные системы, фазовые превращения, устойчивость, диффузионное смешение.

DOI: 10.31857/S0207401X22030098**ВВЕДЕНИЕ**

Реально используемые в процессе самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) составы часто представляют собой смеси порошков с размерами частиц, сопоставимыми с характерными масштабами волны горения. Наблюдаемые экспериментально макроскопические закономерности химического взаимодействия есть результат достаточно сложных процессов, протекающих на микроуровне. Учет неоднородности гетерогенных сред приводит к необходимости разработки таких математических моделей, в которых необходимо учитывать многофазность, многокомпонентность и многостадийность химического превращения. Такие исследования дают возможность изучить природу нестационарных явлений экзотермического превращения гетерогенных систем и процессы инициирования волновых режимов горения, установить возможность предельного перехода от классического гомогенного описания процесса к дискретному, связанному с неоднородностью структуры гетерогенных систем.

Для анализа горения гетерогенных систем с учетом масштаба неоднородности среды в работах [1–3] были предложены модельные системы, где изучалось влияние толщины химически активных слоев на распространение фронта. Влияние диффузионного переноса на процессы горения и структурообразования экспериментально

исследовалось при горении реакционных многослойных наноразмерных пленок [4, 5], где в качестве горючего использовались “традиционные” системы, используемые в процессах СВС. В работе [6] при экспериментальном исследовании формирования на поверхности никеля многослойного графенового покрытия получено, что высокотемпературное взаимодействие углеводородных волокон с никелем обеспечивается путем диффузионного смешения химически активных компонент с переходом через границу контакта слоя углерода и никеля. Скорость экзотермического превращения такой смеси зависит от толщины углеводородных волокон. Влияние геометрических факторов на закономерности “жидкофазного” горения при получении литой силицидной керамики отмечено в экспериментальном исследовании [7]. В работе [8] исследовалось горение цилиндрических образцов из порошка магнезия насыпной плотности в воздушной среде. Введение в образец нескольких процентов мелкодисперсного порошка оксида железа приводило к возрастанию степени химического превращения магнезия.

В работе [9] предложена математическая модель, описывающая горение конденсированной системы, в которой реагирующая среда представлена в виде двух слоев, ориентированных параллельно направлению распространения волны горения. На границе контакта реагентов образуется слой твердого продукта, толщина которого увели-

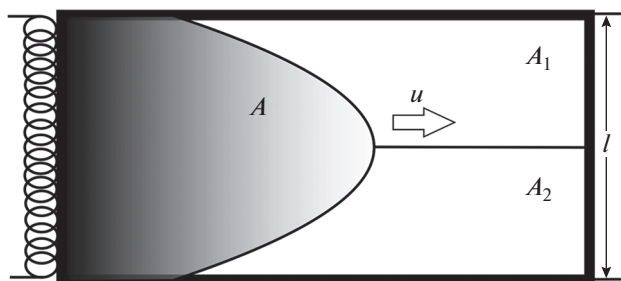


Рис. 1. Схема горения двухслойной системы: u – скорость распространения горения, A_1 и A_2 – концентрации реагентов, A – концентрация продуктов горения, l – толщина двухслойной системы.

чивается со временем благодаря диффузионным процессам переноса. Задача о стационарном распространении фронта горения здесь была сведена к анализу одномерного процесса неизотермической диффузии в области с подвижными границами реагентов и процесса распространения тепла под действием тепловых источников на этих границах. В работе [10] представлен теоретический анализ горения слоевой системы с учетом диффузионно-контролируемой гетерогенной реакции. В предположении температурной однородности системы в поперечном направлении получено выражение, описывающее распределение температуры при распространении фронта горения в условиях диффузионно-контролируемой реакции.

В работе [11] проведен приближенный аналитический анализ устойчивости фронта горения, распространяющегося вдоль границы контакта слоев в предположении существования узкой зоны реакции, где происходит частичное превращение вещества, и широкой зоны догорания. Показано, что ширина второй зоны зависит от толщины слоев и пропорциональна характерному времени формирования бидисперсной смеси, увеличение толщины слоев приводит к потере устойчивости горения, а уменьшение теплопотерь стабилизирует горение. Влияние масштабных факторов и диффузионных процессов на горение гетерогенных сред теоретически изучалось в работе [12]. Здесь была предложена математическая модель, описывающая горение идеализированной по структуре среды, состоящей из сферических частиц двух сортов. Предполагалось, что твердые частицы одного сорта в зоне прогрева плавятся и растекаются между сферическими частицами второго сорта. При достижении температуры плавления частиц второго сорта происходят смешение реагентов из-за молекулярной диффузии и объемная реакция между ними с выделением тепла. С помощью одномерной модели были получены условия реализации кинетического и диффузионного

режимов горения в зависимости от размера частиц и температуры плавления тугоплавкого компонента.

При горении двухслойных систем типа “сэндвич” оба слоя могут плавиться, и уже жидкие реагенты смешиваются и реагируют. В таких условиях диффузионного переноса скорость транспорта компонентов может быть соизмерима со скоростью передачи тепла в холодную часть системы. Это может привести к неоднородному распределению температуры и концентраций компонентов в высокотемпературных зонах, потере устойчивости, формированию неоднородного продукта на границе контакта слоев, вырождению горения с увеличением толщины последних.

Цели представленной работы – исследование методами математического моделирования иницирования и распространения горения вдоль границы контакта слоев в условиях фазовых превращений конденсированных сред, диффузионного смешения и экзотермического превращения бидисперсной смеси, изучение неустойчивых режимов распространения фронта, а также проведение численного нестационарного анализа влияния теплопотерь и толщины слоев на распространение горения.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Схематически двухслойная система, в которой высокотемпературный фронт горения распространяется вдоль поверхности контакта слоев, представлена на рис. 1. Иницирование горения осуществляется у боковой поверхности системы посредством контакта с накаливаемой поверхностью, температура которой – T_{in} . Каждый слой может плавиться при достижении температуры фазового перехода – T_m . Для простоты предполагаем, что температуры плавления слоев совпадают. Формирование жидкой фазы стимулирует диффузионное смешение реагентов и их химическое превращение. Жидкое состояние слоев характеризуется переменной η , величина которой указывает на объемную долю жидкой фазы в единице объема.

Задача смешения реагентов с учетом фазового перехода решается без явного выделения поверхности раздела фаз. Фазовый переход заменяется неизотермическим “химическим” процессом, когда формирование жидкой фазы и кристаллизация происходят в “узком” температурном слое [13].

Экзотермическое взаимодействие описывается в рамках одностадийной реакции $A_1 + A_2 \rightarrow A$, где A – продукт горения. Реакция происходит только после диффузионного смешения, скорость экзотермического взаимодействия определяется концентрациями a_1 и a_2 химически активных компонент. Предполагается, что теплофизические ха-

рактические характеристики продуктов горения совпадают с начальными теплофизическими характеристиками слоев.

Для описания фазового превращения слоев предложено безразмерное макрокинетическое уравнение, которое имеет следующий вид:

$$Z(\eta, \theta) = \frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \begin{cases} k_m (1 - \eta) \operatorname{sign}(\theta - \theta_m) \exp(|\theta - \theta_m| \Delta), & 0 < \eta < 1, \\ 0, & \text{если } \eta = 0 \text{ или } \eta \geq 1. \end{cases} \quad (1)$$

Параметры Δ и k_m регулируют температурную “ширину” зоны фазового перехода, τ – безразмерное время, θ – безразмерная температура. Уравнение (1) учитывает направление процесса фазового перехода – плавление и кристаллизацию.

При анализе горения двухслойной системы предполагается, что плотность, теплофизические свойства и толщины слоев одинаковые. Уравнение, описывающее теплоперенос и распространение фронта горения вдоль границы контакта двухслойной системы, имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \psi} \right) + a_1 a_2 \exp\left(\frac{\theta}{1 + \beta \theta}\right) - \Delta_K \Delta_Q Z(\eta, \theta), \quad (2)$$

$$\frac{\partial a_1}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\operatorname{Le} \frac{\partial a_1}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\operatorname{Le} \frac{\partial a_1}{\partial \psi} \right) - \gamma a_1 a_2 \exp\left(\frac{\theta}{1 + \beta \theta}\right), \quad (3)$$

$$\frac{\partial a_2}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\operatorname{Le} \frac{\partial a_2}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\operatorname{Le} \frac{\partial a_2}{\partial \psi} \right) - \gamma a_1 a_2 \exp\left(\frac{\theta}{1 + \beta \theta}\right), \quad (4)$$

где

$$\operatorname{Le} = \begin{cases} \operatorname{Le}_0, & \text{если } \theta \geq \theta_m, \\ 0, & \text{если } \theta < \theta_m. \end{cases}$$

Краевые условия:

$$\theta(0, \psi, \tau) = \theta_{in}, \quad \tau \leq \tau_{imp}; \quad \frac{\partial \theta(0, \psi, \tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \tau > \tau_{imp}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \theta(\xi, 0, \tau)}{\partial \psi} = \frac{\partial \theta(\xi, l, \tau)}{\partial \psi} = \alpha(\theta - \theta_0). \quad (6)$$

Начальные условия:

$$\theta(\xi, \psi, 0) = \theta_0, \quad \eta(\xi, \psi, 0) = 0, \quad a_1(\xi, \psi, 0) = 1, \quad a_2(\xi, \psi, 0) = 0 \quad \text{при } 0 \leq \psi \leq \frac{1}{2}, \quad (7)$$

$$a_1(\xi, \psi, 0) = 0, \quad a_2(\xi, \psi, 0) = 1 \quad \text{при } \frac{1}{2} \leq \psi \leq 1.$$

В математической модели учитываются теплопотери через боковую поверхность. Масштабные величины и безразмерные переменные: θ_{in} – температура инициирования, ξ и ψ – пространственные переменные. Характерная температура процесса

$$T_* = T_0 + (Q_m + Q_c)/c, \quad \gamma = \frac{RT_*^2 c}{EQ}, \quad \beta = \frac{RT_*}{E},$$

$$\theta = \frac{E(T - T_*)}{RT_*^2}, \quad \theta_0 = \frac{E(T_0 - T_*)}{RT_*^2}, \quad \theta_m = \frac{E(T_m - T_*)}{RT_*^2},$$

$$\operatorname{Le}_0 = \frac{c\rho D_0}{\lambda}, \quad t_* = \frac{\gamma \exp(1/\beta)}{K_c}, \quad x_* = y_* = \sqrt{\frac{\lambda t_*}{c\rho}},$$

$$\Delta_K = \frac{K_m}{K_c}, \quad \Delta_Q = \frac{Q_m}{Q_c}, \quad \xi = \frac{x}{x_*}, \quad \psi = \frac{y}{x_*}, \quad \tau = \frac{t}{t_*}, \quad l = \frac{\bar{l}}{x_*}$$

безразмерная толщина слоя, α – коэффициент теплопотери. Размерные величины: x и y – координаты, T_0 и T_m – начальная температура и температура фазового перехода, R – универсальная газовая постоянная, K_c и K_m – предэкспоненты, E и Q_c – энергия активации и тепловой эффект экзотермической реакции, Q_m тепловой эффект фазового перехода, c, ρ, λ – теплоемкость, плотность и теплопроводность, \bar{l} – поперечный размер двухслойной системы. Предполагается, что при температурах T ниже температуры плавления слоев T_m диффузионным переносом можно пренебречь, а при температуре выше происходит скачкообразное изменение коэффициента диффузии D .

Математическая модель (1)–(7) при соответствующих граничных и начальных условиях численно исследовалась методом переменных направлений [14] с применением двумерной прямоугольной регулярной сетки. В процессе численного моделирования соблюдались законы сохранения энергии (консервативные разностные схемы).

Неявная трехточечная аппроксимация вторых производных позволяла регулировать шаг по времени с учетом точности расчета и обеспечения устойчивости разностной схемы. Временной шаг являлся функцией скорости тепловыделения и температуры в зоне реакции.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Адиабатическое горение ($\alpha = 0$). На рис. 2 на плоскости (ξ, ψ) представлено пространственное

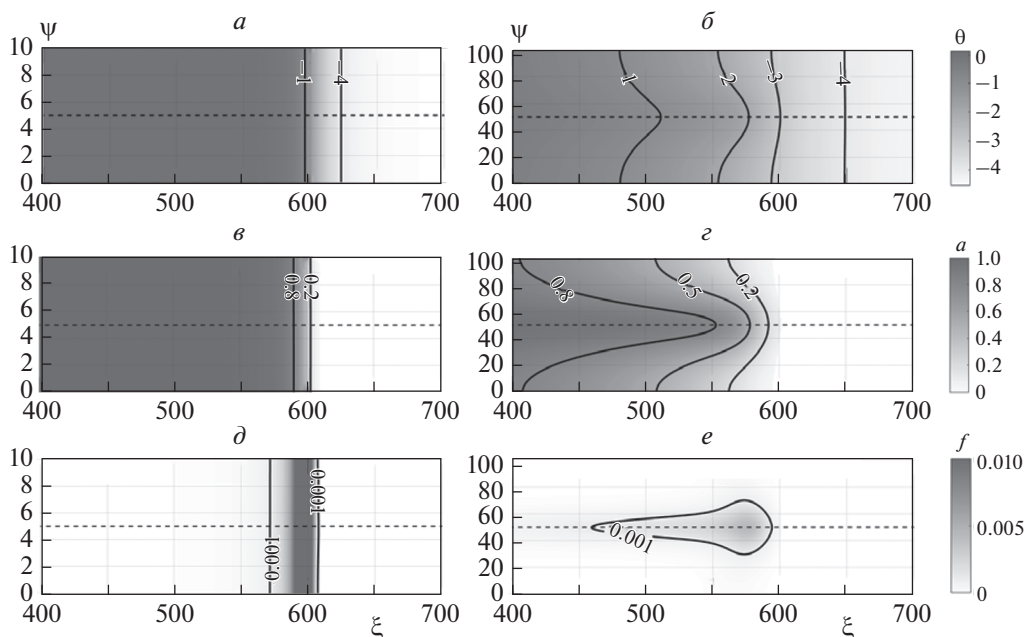


Рис. 2. Безразмерные поля температуры θ (а, б), концентрации a продуктов горения (в, г) и функции тепловыделения f (д, е) в двухслойной системе при $l = 10$ (а, в, д) и 100 (б, г, е) при $\beta = 0.192$, $\gamma = 0.219$, $\theta_0 = -4.56$, $Le_0 = 0.2$, $\Delta_K = 1$, $\Delta_Q = 0.125$, $\theta_m = -3.04$.

распределение температуры, концентрации продуктов горения и функции тепловыделения $f(a_1, a_2, \theta) = a_1 a_2 \exp(\theta/(1 + \beta\theta))$ при распространении фронта экзотермической реакции. Процесс горения инициируется высокотемпературным поверхностным источником, т.е. $\theta_m = 0$. Скорость распространения горения вычислялась по движению изолинии концентрации продуктов горения $a = 0.8$ на границе контакта слоев. При горении “тонкого” слоя толщиной $l = 10$ формировался фронт, распространяющийся вдоль границы с постоянной скоростью (рис. 2а, в, д). Плавление слоев протекало по всей их ширине исключительно за счет теплового потока из высокотемпературной области. Диффузионное смешение и прогрев приводили к воспламенению двухкомпонентной смеси, которая формировалась еще до начала реагирования, т.е. диффузионный процесс не ограничивал горение. При толщине слоя $l = 100$ жидкие компоненты не успевают полностью смешаться перед зоной горения (рис. 2б, г, е). Широкая область горения характеризуется температурной и концентрационной неоднородностью. Изолиния при концентрации продуктов $a = 0.8$ показывает, что процесс диффузии происходит в основном в перпендикулярном направлении распространения горения (в направлении оси ψ , см. рис. 2г). При такой толщине слоев неоднородность по температуре и составу в зоне реагирования не позволяет перейти к одномерному описанию распространения горения.

На рис. 2д, е представлены изолинии функции тепловыделения в случае распространения горения при разных толщинах слоев. При $l = 10$ формируется плоский фронт, распространяющийся вдоль границы контакта (рис. 2д). При увеличении толщины слоев реакция протекает в диффузионном режиме, максимум скорости тепловыделения сосредоточен на границе контакта слоев (рис. 2е). Толщина перемешанного слоя уменьшается относительно толщины системы, диффузионный процесс ограничивает распространение волны, усредненная температура и скорость фронта падают. Дальнейший рост толщины слоев приводит к вырождению горения.

Внешние теплопотери. Пример волновой структуры в состоянии квазистационарного распространения фронта в условиях теплоотвода с поверхности слоя представлен на рис. 3. Предполагалось, что температура поверхности слоев равняется температуре окружающей среды. Внешние теплопотери привели к плавлению слоев не на всю глубину (рис. 3а). В области расплава происходят интенсивное смешение компонентов и их химическое взаимодействие. На границе контакта с внешней средой формируется непрореагировавший слой исходного вещества, который служит тепловым экраном для внутренней высокотемпературной реагирующей области расплава. Локализованная зона перемещается со скоростью фронта, на ее границе скорость кристаллизации равняется скорости плавления. На рис. 4б, в пред-

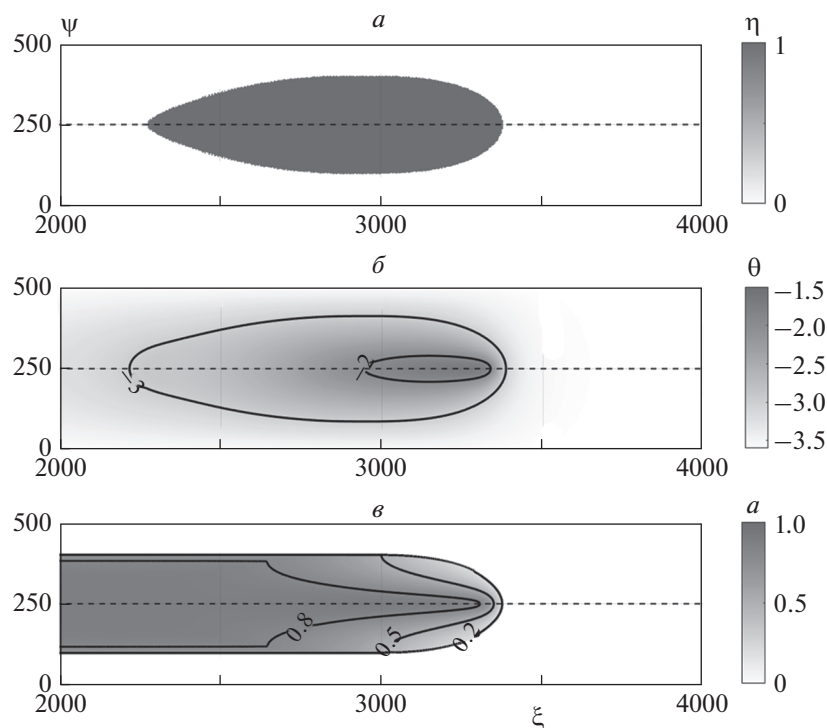


Рис. 3. Поля расплава η (а), температуры θ (б) и концентрации a продуктов горения, формирующиеся при распространении горения в условиях теплопотерь. Параметры системы: $\beta = 0.216$, $\gamma = 0.278$, $\theta_0 = -3.6$, $Le_0 = 0.4$, $\Delta_K = 1$, $\Delta_Q = 0.125$, $\theta_m = -2.91$, $l = 500$.

ставлено поле температуры θ и концентрации a продуктов горения. Интенсивность химического тепловыделения характеризуют изолинии концентрации продуктов горения (рис. 3в). Нелинейная связь процессов теплоотвода, диффузионного переноса и тепловыделения показала, что при $l > 600$ происходит срыв горения, который связан со значительным теплоотводом из зоны расплава в не реагирующую область.

Неустойчивое горение. При горении безгазовых систем наличие избыточной энтальпии в прогретом слое при высокой чувствительности скорости тепловыделения к температуре приводит к неустойчивости стационарного режима горения. В работе [15] показано, что потеря устойчивости фронта реализуется в условиях сильной активированности экзотермического химического превращения (большая энергия активации E и соответственно, малое значение параметра γ). В этом случае вместо устойчивого стационарного фронта формируются устойчивые периодические фронтальные (пульсирующие) режимы. Для анализа возможных неустойчивых режимов горения, распространяющихся вдоль границы контакта, вводится функция A_W , которая отображает меру неоднородности продукта реакции после горения двухслойной системы:

$$A_W = - \int_0^{\tau_{max}} \frac{\partial a_1 a_2}{\partial \tau} (\theta - \theta_0) d\tau.$$

На рис. 4а представлено поле функции A_W после распространения горения в пульсирующем режиме. Горение характеризуется периодическим изменением температуры и скорости фронта. В момент “вспышки” (рис. 4б) температура в области контакта слоев растет, что приводит к росту интенсивности химической реакции и большей полноте превращения реагентов. В момент депрессии полнота превращения падает. Такой характер горения приводит к формированию периодических неоднородностей в структуре продуктов горения.

СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ

Влияние внешних теплопотерь на фронтальное распространение реакции вдоль титановых нитей, покрытых слоем никеля, исследовалось в работе [16]. В зависимости от диаметра титановой нити и толщины слоя никеля обнаружены различные режимы протекания горения. Показано существование критических толщин слоев, когда после локального воспламенения формируется жидкая капля, которая распространяется с постоянной скоростью вдоль нити. Установлено, что

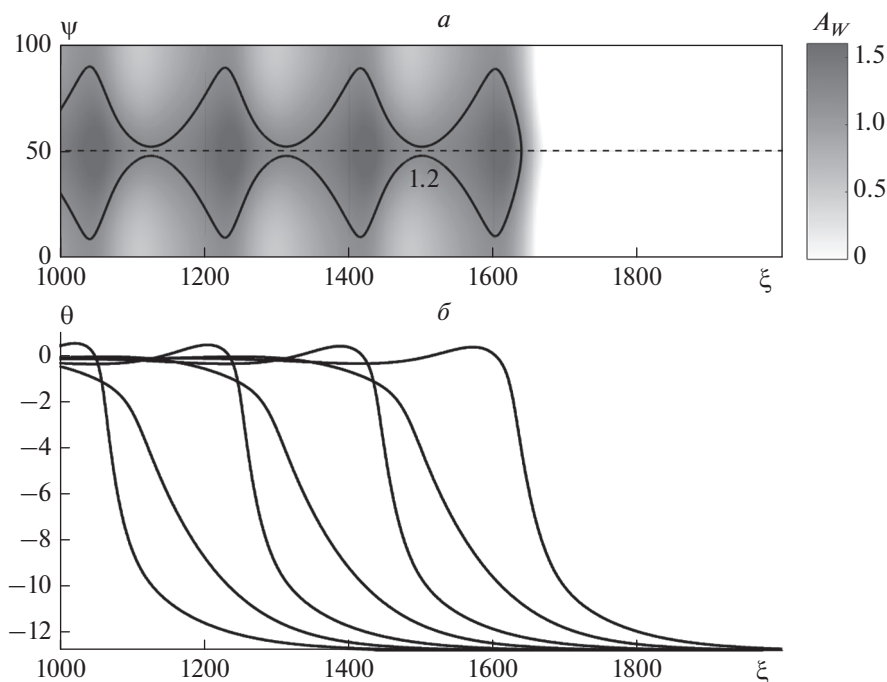


Рис. 4. Поле функции A_W (а) и пространственно-временное распределение температуры при распространении горения вдоль границы контакта слоев (б). Параметры системы: $\beta = 0.071$, $\gamma = 0.078$, $\theta_0 = -12.75$, $Le_0 = 0.2$, $\Delta_K = 1$, $\Delta_Q = 0.1$, $\theta_m = -9.44$, $l = 100$.

увеличение диаметра проволоки и толщина слоя никеля сначала приводит к падению скорости распространения фронта с частичным недогоранием слоев. Существует критическая толщина слоев, при превышении которой горение не реализуется. Критические явления срыва горения наблюдались и при малых диаметрах проволоки и толщины никелевого покрытия. Критические условия существования горения связаны как с процессами диффузионного смешения компонент, так и с влиянием лучистых и кондуктивных теплопотерь.

Аналогичные зависимости были обнаружены при анализе горения скрученных проволок алюминия и никеля диаметром 0.3 (Ni) и 0.4 мм (Ti) в инертной и воздушной газовой средах [17]. Влияние фазовых превращений на горение активированных и неактивированных смесей Ti/Ni изучалась в работе [18], где также превращение происходило в условиях плавления компонент смеси и скорость распространения горения зависела от масштабных характеристик порошковой смеси.

Существование колебательного волнового режима горения в пленках Ti/Al экспериментально обнаружено с помощью скоростной микровидеосъемки в работе [19]. Здесь авторы определили характеристики авоколебательного фронта, а именно частоту и длину волны. Аналогичные колебательные характеристики горения были изучены в работе [20] при горении пленок Zr/Al/CuNi. С помощью анализа микроструктуры продукта вол-

нового превращения была показана периодическая неоднородность состава продуктов горения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью предложенной нестационарной математической модели установлена возможность распространения горения вдоль границы контакта слоев в условиях диффузионного смешения плавящихся химически активных компонентов. Рост температурной и концентрационной неоднородности с увеличением толщины слоевой системы приводит к падению скорости распространения фронта. Существует критическая толщина слоев, при превышении которой происходит вырождение горения. При автоколебательном характере распространения фронта формируются периодические неоднородности в структуре продуктов горения. Внешние теплопотери приводят к локализации области плавления, где происходит полное диффузионное смешение и экзотермическое превращение бидисперсной смеси.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мерджанов А.Г., Кришеник П.М., Шкадинский К.Г. // Докл. РАН. 2001. Т. 380. № 3. С. 323.
2. Кришеник П.М., Мерджанов А.Г., Шкадинский К.Г. // Физика горения и взрыва. 2002. Т. 38. № 3. С. 70.

3. *Ивлева Т.П., Кришеник П.М., Мержанов А.Г., Шкадинский К.Г.* // Хим. физика. 1983. Т. 3. № 9. С. 1259.
4. *Rogachev A.S., Vadchenko S.G., Mukasyan A.S.* // Appl. Phys. Lett. 2012. V. 101. P. 063119; <https://doi.org/10.1063/1.4745201>
5. *Рогачев А.С., Мукасян А.С.* // Физика горения и взрыва. 2015. Т. 51. № 1. С. 66.
6. *Сычев А.Е., Вадченко С.Г., Шукин А.С. и др.* // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 1. С.
7. *Горшков В.А., Милосердов П.А., Сачкова Н.В.* // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 2. С. 16.
8. *Крупкин В.Г., Шмелев В.М.* // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 12. С. 53.
9. *Алдушин А.П., Хайкин Б.И.* // Физика горения и взрыва. 1974. Т. 10. № 3. С. 313.
10. *Armstrong R.* // Metall. Trans. A. 1992. V. 23. № 9. P. 2339; <https://doi.org/10.1007/BF02658035>
11. *Jayaraman S., Knio O.M., Mann A.B. et al.* // J. Appl. Phys. 1999. V. 86. № 2. P. 800.
12. *Околович Е.В., Мержанов А.Г. Хайкин Б.И., Шкадинский К.Г.* // Физика горения и взрыва. 1977. Т. 17. № 3. С. 326.
13. *Алдушин А.П., Мержанов А.Г.* // Докл. АН СССР. 1972 Т. 236. № 5. С. 1133.
14. *Самарский А.А.* Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971.
15. *Шкадинский К.Г., Хайкин Б.И., Мержанов А.Г.* // Физика горения и взрыва. 1971. Т. 11. № 1. С. 19.
16. *Вадченко С.Г., Булаев А.М., Гальченко Ю.А., Мержанов А.Г.* // Там же. 1987. Т. 23. № 6. С. 46.
17. *Salamatov V.G., Kirdyashkin A.I., Kitaler V.D.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. V. 1115. № 4. P. 042033; <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1115/4/042033>
18. *Кочетов Н.А., Сеплярский Б.С.* // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 2. С. 39.
19. *Rogachev A.S., Kochetov N.A., Yagubova I.Yu. et al.* // Intern. J. Self-Propag. High-Temp. Syns. 2004. V. 13. № 4. P. 285.
20. *Trenkle J.C., Wang J., Weihs T.P. et al.* // Appl. Phys. Letter. 2005. V. 87. P. 153108; <https://doi.org/10.1063/1.2099544>

**ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ**

УДК 533.6:621.373

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК
САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ БЕДНЫХ СМЕСЕЙ H_2 –ВОЗДУХ**© 2022 г. А. М. Тереза^{1*}, Г. Л. Агафонов¹, Э. К. Андержанов¹, А. С. Бетев¹,
С. П. Медведев¹, С. В. Хомик¹¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук,
Москва, Россия

*E-mail: tereza@chph.ras.ru

Поступила в редакцию 18.01.2022;

после доработки 15.02.2022;

принята в печать 21.02.2022

Проведено численное моделирование процессов самовоспламенения и горения бедных и ультрабедных водородно-воздушных смесей применительно к вопросам безопасности АЭС; рассчитаны величины задержек воспламенения τ и ламинарной скорости горения S_L . Сравнение расчетов, проведенных в температурном диапазоне от 800 до 1700 К при начальном давлении, равном 1 и 6 атм, показало, что величина τ , как и форма температурных зависимостей при самовоспламенении, слабо зависят от начальной концентрации водорода в воздухе. Установлено, что наибольшее различие в значениях τ , рассчитанных по разным детальным кинетическим механизмам (ДКМ), наблюдается при температуре 900 и 1100 К соответственно для давления 1 и 6 атм. Показано, что при начальной температуре выше 1250 К время достижения максимума тепловыделения существенно превышает величину τ . При расчетах S_L по всем ДКМ получены близкие между собой значения. Делается вывод, что для моделирования процессов самовоспламенения и горения бедных и ультрабедных водородно-воздушных смесей при давлении ниже 6 атм с удовлетворительной степенью точности можно использовать любой из рассмотренных ДКМ.

Ключевые слова: бедная водородно-воздушная смесь, самовоспламенение, задержка воспламенения, ламинарная скорость горения, численное моделирование, химическая кинетика, детальный кинетический механизм.

DOI: 10.31857/S0207401X2208012X

ВВЕДЕНИЕ

При разработке новых методов повышения пожаровзрывобезопасности на АЭС с водяным охлаждением и связанных с ними конструктивных решений одной из актуальных задач является прогнозирование самовоспламенения и горения бедных и ультрабедных водородно-воздушных смесей [1–5]. Решение таких задач сопряжено с необходимостью выбора условий и характеристик для определения критериев возникновения очагов самовоспламенения и распространения пламени по образующимся водородно-воздушным смесям. Существует неопределенность в том, что считать фактором, приводящим к разрушению конструкции АЭС. Тем не менее прогностические исследования процессов горения смесей H_2 –воздух при различных физико-химических условиях значительно способствуют развитию проектно-конструкторских работ, связанных с надежностью работы АЭС в аварийных ситуациях. В этой связи становится важным использование вычислительных методик режимов горения сме-

сей H_2 –воздух. Различные методы численного моделирования, используемые при таком подходе, требуют использования детальным кинетических механизмов (ДКМ), которые применительно к смесям H_2 – O_2 в настоящее время широко представлены в литературе [6–20]. В то же время остаются вопросы, связанные с различием результатов численного моделирования задержек воспламенения с использованием разных ДКМ [14, 15, 18, 19, 21].

Валидация каждого ДКМ проходит посредством сравнения результатов численного моделирования с собственными и представленными в литературе экспериментальными данными и подбора параметров констант скорости элементарных реакций. Помимо того, что разброс значений самих констант значителен [22], выбор экспериментальных данных для валидации ДКМ осложняется отсутствием единого подхода к описанию процессов воспламенения и горения. Так, задержка воспламенения τ , являющаяся одним из основных параметров, по которому проводится

разработка и тестирование ДКМ, для смесей H_2-O_2 имеет огромный разброс по своим значениям в зависимости от температуры [23]. Величина τ является брутто-характеристикой процесса воспламенения и зависит от правильности интерпретации экспериментальных результатов в рамках тех условий, для которых она определяется. В работах [15, 23, 24] перечислены основные причины, из-за которых наблюдается разброс экспериментальных значений τ . По определению Франк-Каменецкого [25] задержка воспламенения определяется как начало резкого роста давления и температуры. Вблизи концентрационных пределов воспламенения тепловыделение, а следовательно, и рост давления гораздо меньше, чем в области концентраций, близких к стехиометрическим. Кроме того, в некоторых исследованиях задержка воспламенения определялась при постоянном давлении [23], что исключает применение критерия, основанного на росте давления. В работах [26, 27] показано, что в таких случаях проводить измерения τ целесообразно по сигналу эмиссии электронно-возбужденного радикала OH^* и по выходу H_2O . Помимо этих двух соединений, для определения τ используются профили временных зависимостей концентрации исходных реагентов, а также промежуточных и конечных продуктов воспламенения смесей H_2-O_2 [10, 12, 14, 15, 17, 20, 26, 28–35].

В тех случаях, когда ДКМ разрабатывались под конкретные научно-исследовательские и конструкторские задачи, их применимость к процессам горения при других или более широких условиях воспламенения смесей H_2-O_2 может приводить к заметным расхождениям [10, 14, 15, 36, 37]. Наибольшие различия в результатах численного моделирования по разным ДКМ наблюдаются при повышенном давлении и относительно низких температурах $T_0 < 1100$ K [15, 19, 21, 33, 38–40].

Применительно к задачам по обеспечению пожаровзрывобезопасности на АЭС [41] не требуется универсальность ДКМ. Образующийся при радиолизе воды в системе охлаждения АЭС водород в смеси с воздухом способен воспламеняться вблизи нижнего концентрационного предела воспламенения, т.е. в бедных и ультрабедных составах. В этом случае процесс воспламенения характеризуется относительно малым выделением тепла, что сказывается на особенностях распространения пламени [42]. Процесс химических превращений проходит в замкнутом пространстве помещений и реакторного зала и ограничен давлением, не превышающим предельные значения, при которых конструкции АЭС могут быть разрушены.

В работе проведено численное моделирование самовоспламенения бедных водородно-воздушных смесей в ограниченном диапазоне давления и заданном температурном интервале с использо-

ванием различных ДКМ. Анализ полученных результатов позволяет оценить степень применимости рассматриваемых ДКМ к прогнозированию ситуаций, связанных с пожаровзрывобезопасностью АЭС.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРЕДЕЛЬНОГО ДАВЛЕНИЯ

Рассмотрение основных путей снижения (ослабления) взрывных нагрузок при горении смесей водород–воздух подробно описано в работе [43]. Рассмотрев зависимость амплитуды нагрузок на конструкцию АЭС от скорости горения в широком диапазоне концентраций – от 11% до 34% водорода по объему, авторы [43] установили предельные условия по давлению на уровне 5.5–6 атм. До этой границы все представленные экспериментальные данные удовлетворительно описываются прямой линией. Граница соответствует скорости около 400 м/с (скорость звука в исходной горючей водородно-воздушной смеси). При увеличении давления с 6 до 12 атм амплитуда наблюдаемой нагрузки резко возрастает. Это обусловлено известной фундаментальной закономерностью ускорения пламени и перехода горения в детонацию, согласно которой при превышении пламенем скорости звука с большой вероятностью происходит инициирование детонационного или детонационно-подобного режима сгорания с уровнем нагрузок более 12 атм. Таким образом, ставится задача ослабления взрывной нагрузки путем уменьшения скорости взрывного процесса. Особую важность представляет смещение (снижение) скорости распространения фронта горения в дозвуковую область, поскольку при этом величина избыточного давления скачкообразно уменьшается с 12 до менее чем 6 атм. Одновременно требуется найти способ снизить вероятность самовоспламенения бедных водородно-воздушных смесей при давлении, не превышающем 6 атм.

МЕТОДИКА ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Все расчеты проводились с использованием программного модуля CHEMKIN-Pro, входящего в пакет ANSYS (Academic version) [44]. При выборе ДКМ мы опирались на следующие принципы:

- используемые ДКМ разрабатывались для широкого класса исследовательских и технологических задач и представлены в литературе независимыми научными коллективами;
- валидация и апробация ДКМ проводились не только по температурным зависимостям задержек воспламенения и скорости горения ламинарного пламени, но и по форме временных профилей исходных реагентов и продуктов воспламенения смесей H_2-O_2 .

Было выбрано пять следующих ДКМ, специально разработанных для изучения горения водородно-воздушных смесей [13–16, 19]. Исследовалось самовоспламенение смесей водорода и воздуха двух концентраций: ультрабедная (6% H_2) и бедная (14% H_2). Начальное давление в расчетах полагалось равным 1 и 6 атм, температура варьировалась в диапазоне от 800 до 1700 К, что соответствовало характерному тепловыделению при сгорании бедных смесей H_2 –воздух [42]. При всех расчетах использовались термофайлы в стандарте NASA [45], прилагаемые к каждому из используемых ДКМ. Задержка воспламенения τ определялась при условии $V = \text{const}$ по моменту времени, соответствующему максимальной скорости роста давления.

Расчеты ламинарной скорости распространения пламени S_L по смеси при $T_0 = 298$ К проводились с использованием мультикомпонентных коэффициентов переноса и с учетом термодиффузии для смесей, концентрация водорода в которых превышала 12%. Для моделирования нормальной скорости горения использовался модуль PREMIX с количеством точек сетки не менее 1500, что соответствует рекомендациям из работы [13]. Транспортные коэффициенты принимались соответственно прилагаемым к каждому ДКМ файлам.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Температурные зависимости, рассчитанные по разным ДКМ для смеси с 6% и 14% H_2 в воздухе при давлениях P_0 , равных 1 и 6 атм, представлены на рис. 1. Видно, что все используемые ДКМ предсказывают S-образный характер температурной зависимости τ , но дают разные количественные результаты. Наибольшее расхождение наблюдается в области $850 < T_0 < 1000$ К для $P_0 = 1$ атм и $1000 < T_0 < 1300$ К для $P_0 = 6$ атм. Для $P_0 = 1$ атм максимальное расхождение τ для смеси с 6% H_2 в воздухе достигает 4.8 раз при $T_0 = 900$ К, а для $P_0 = 6$ атм при $T_0 = 1100$ К – 4.4 раз между ДКМ из работ [13] и [19] (табл. 1). При увеличении доли водорода в воздухе эти различия уменьшаются. Из рис. 1 видно, что интервалы максимального расхождения результатов расчета значений τ по разным ДКМ соответствуют области температурной зависимости $\tau(T)$ с наибольшим “наклоном”, где наблюдается характерный излом. Вследствие этого значение τ в области $T \sim 970$ К при $P_0 = 1$ атм меньше более чем на полтора порядка, чем при $P_0 = 6$ атм. Сравнение рис. 1а и 1б показывает незначительное сокращение задержки воспламенения при увеличении процентного содержания H_2 в воздухе. Из табл. 1 видно, что при увеличении доли водорода с 6 до 14% задержка воспламенения сокращается менее чем в 2 раза при расчетах по всем ДКМ при обоих значениях давления; при

Таблица 1. Рассчитанные по ДКМ значения τ в областях их максимального расхождения

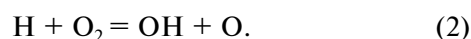
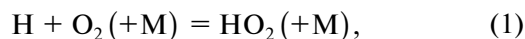
| $\tau, \text{с}$ | | | | ДКМ |
|------------------|-------------|----------------------|----------------------|------|
| 6% H_2^* | 14% H_2^* | 6% H_2^{**} | 14% H_2^{**} | |
| 0.089 | 0.056 | $1.34 \cdot 10^{-4}$ | $7.37 \cdot 10^{-5}$ | [15] |
| 0.132 | 0.085 | $1.59 \cdot 10^{-4}$ | $1.29 \cdot 10^{-4}$ | [16] |
| 0.191 | 0.093 | $3.63 \cdot 10^{-4}$ | $2.11 \cdot 10^{-4}$ | [13] |
| 0.162 | 0.088 | $2.56 \cdot 10^{-4}$ | $1.84 \cdot 10^{-4}$ | [14] |
| 0.04 | 0.026 | $8.26 \cdot 10^{-5}$ | $5.76 \cdot 10^{-5}$ | [19] |

* При $T_0 = 900$ К, $P_0 = 1$ атм.

** При $T_0 = 1100$ К, $P_0 = 6$ атм.

этом в расчетах для доли водорода в 14% наблюдается лучшее согласие в результатах разных ДКМ.

Сложный характер зависимости $\tau(T, P)$ приводит к тому, что наблюдается пересечение кривых этих зависимостей в областях $T \sim 870$ и $T \sim 1100$ К (рис. 1). Такое пересечение кривых задержек воспламенения в области выше 1000 К было отмечено в работах [12–14, 19, 46]. Сложная зависимость τ от давления, характеризующая наличием трех пределов воспламенения, описанных в работе [47], обусловлена конкуренцией ведущих в индукционном периоде реакций



Реакция (1) относится к реакциям мономолекулярного распада [48] и в условиях представленного исследования протекает в переходной области (fall-off) изменения давления. Константа скорости k_1 через аппроксимационные выражения Трое [22] определяется своими предельными значениями k_0 и k_∞ в областях низких и высоких давлений соответственно. В выражении константы скорости k_0 , в свою очередь, учтена эффективность по соударениям с третьим телом (+M). Различие подходов в определении k_1 во многом влияет на разброс значений в величинах τ , предсказываемых разными ДКМ. Помимо реакции (1), с реакцией (2) конкурируют и другие реакции мономолекулярного распада [12, 30], что также усиливает влияние давления в индукционном периоде, определяющем процесс развития цепных разветвленных реакций [49]. Анализ чувствительности показал, что вблизи значений температуры $T_0 = 900$ К при $P_0 = 1$ атм и $T_0 = 1100$ К при $P_0 = 6$ атм только реакции (1) и (2) доминируют в процессе самовоспламенения исследуемых бедных и ультрабедных смесей. С повышением температуры ($T_0 > 1250$ К) начинает проявляться влияние других реакций (рис. 2). Проведенный анализ чувствительности по радикалу OH как одному из ведущих

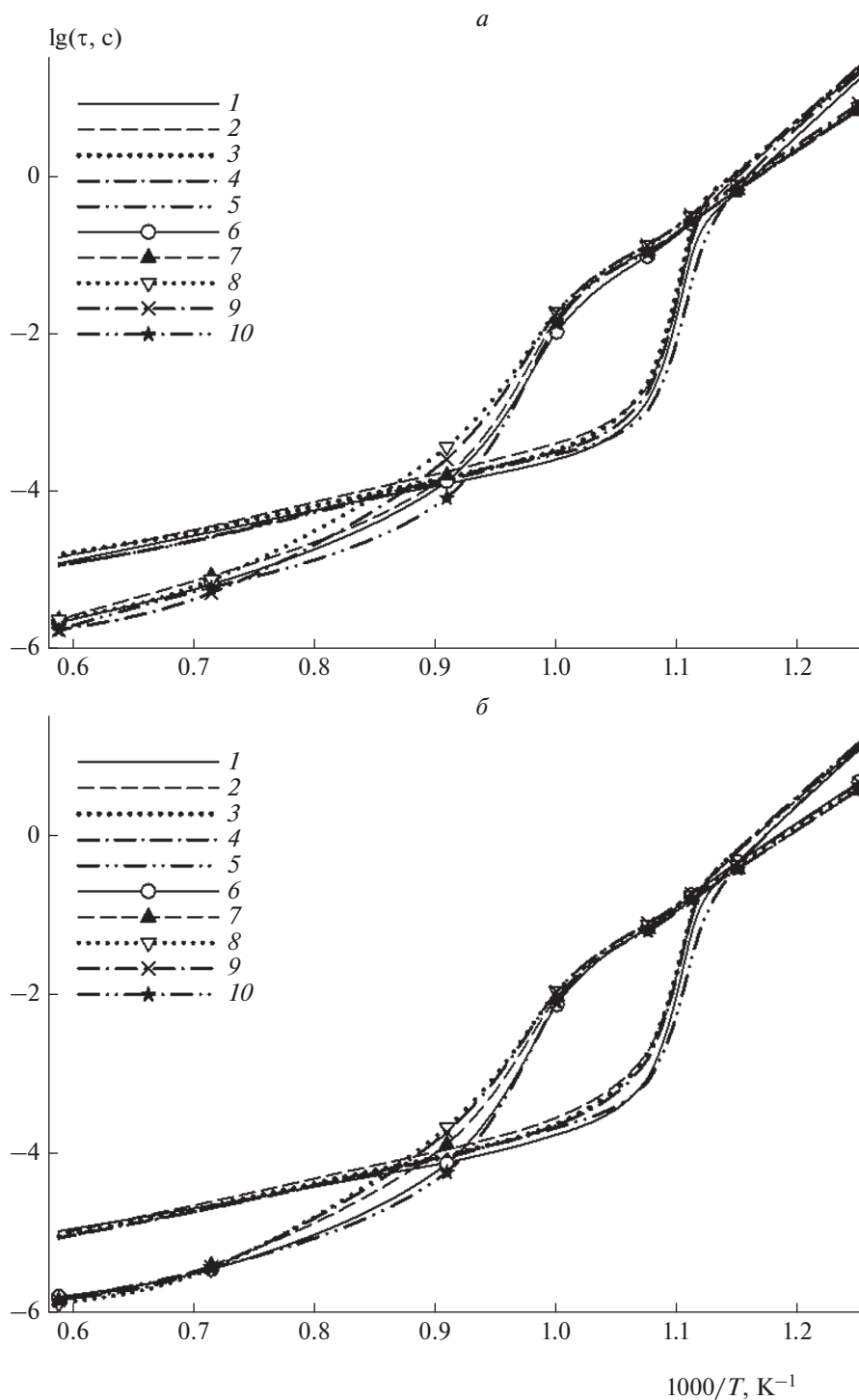
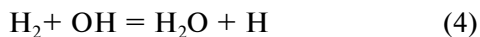
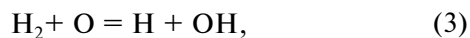


Рис. 1. Температурная зависимость задержки воспламенения смеси 6% H₂ (а) и 14% H₂ (б) с воздухом. Линии 1–5 – P₀ = 1 атм, линии 6–10 – P₀ = 6 атм. Расчеты по ДКМ из работ [15], [16], [13], [14], [19] соответственно.

промежуточных продуктов показывает влияние реакций



с одновременным понижением роли реакции (1). Роль реакции (2) остается ведущей. Влияние доминирующих реакций носит преимущественно колебательный характер во времени, что выражается в немонотонности профиля образования и

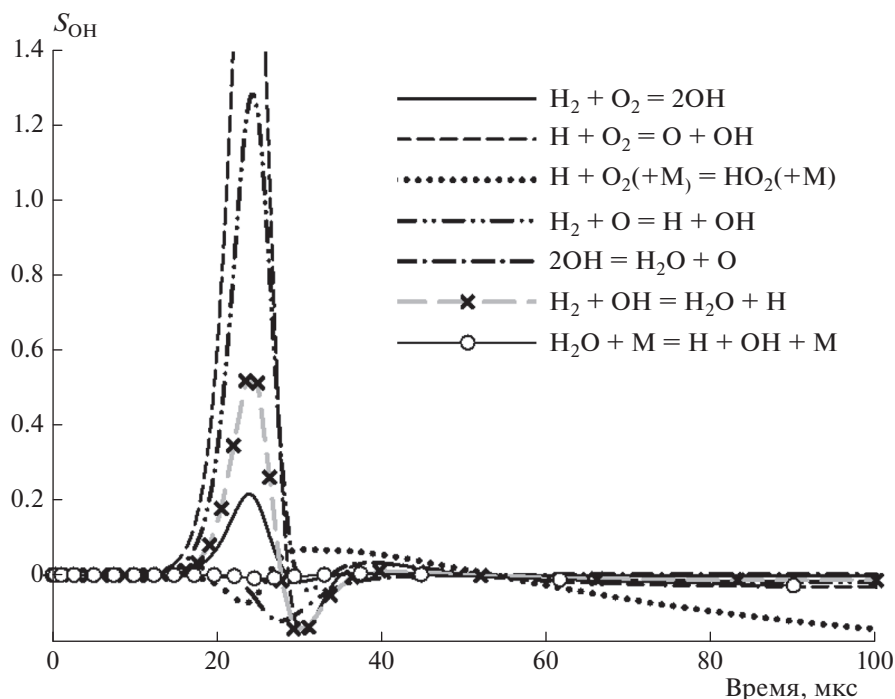
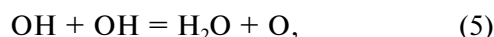


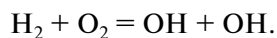
Рис. 2. Анализ чувствительности S по выходу радикала OH для смеси 6% H_2 с воздухом при $T_0 = 1400 \text{ K}$ и $P_0 = 1 \text{ атм}$, рассчитанному по ДКМ из работы [15].

расходования радикала OH (рис. 3). Сравнение рис. 2 и 3 показывает, что в момент наименьшего влияния реакции (2) роль ведущей приобретает реакция



которая и определяет характерный “провал” на графике для концентрации OH вблизи ее максимального уровня. Как соотносятся скорости реакций (1)–(5), во многом и будет определять форму профиля концентрации OH при $T_0 > 1250 \text{ K}$.

Рисунок 3 показывает, что расчеты по всем используемым ДКМ демонстрируют одинаковый характер накопления OH и роста температуры. После достижения максимальных значений концентрация OH падает, в то время как температура продолжает повышаться. Наблюдаемый второй максимум концентрации OH практически равен по величине первому при расчетах по всем ДКМ. Времена достижения максимумов по разным ДКМ также близки. Самый быстрый выход OH наблюдается по ДКМ из работы [15], где учитывается реакция инициирования



В остальных ДКМ эта реакция не рассматривается. Ее влияние, особенно в области высоких давлений и температур от 800 до 1000 K, на сегодняшний день является предметом дискуссий [50]. Самое медленное образование OH демонстрирует ДКМ, представленный в работе [16]. Этот

же ДКМ показывает и более медленный рост температуры и большую задержку воспламенения по сравнению с остальными ДКМ для условий, приведенных на рис. 3. Самый быстрый рост температуры демонстрирует ДКМ из работы [19]. Рисунок 3 показывает, что температура монотонно растет по расчетам по всем ДКМ после достижения обоих максимумов OH , характеризуя тем самым немгновенное тепловыделение. Рост температуры на стадиях самовоспламенения после достижения максимума промежуточного продукта OH определяется в области высоких температур экзотермическими реакциями рекомбинации, подобными (1) и $\text{H} + \text{OH} + \text{M}$ (рис. 2). По мере увеличения температуры свыше 1250 K основное тепловыделение наблюдается уже после достижения максимума промежуточных продуктов и, соответственно, на временах, больших значения τ . Немгновенное тепловыделение в процессе самовоспламенения смесей H_2 –воздух может сказываться при численном моделировании переходных процессов из горения в детонацию и обратно, поскольку они являются чувствительными к градиенту температуры [51]. Это еще раз подтверждает, что при проведении численного моделирования подобных процессов необходимо использовать ДКМ, а не глобальные кинетические механизмы и упрощающие расчеты мгновенное суммарное тепловыделение.

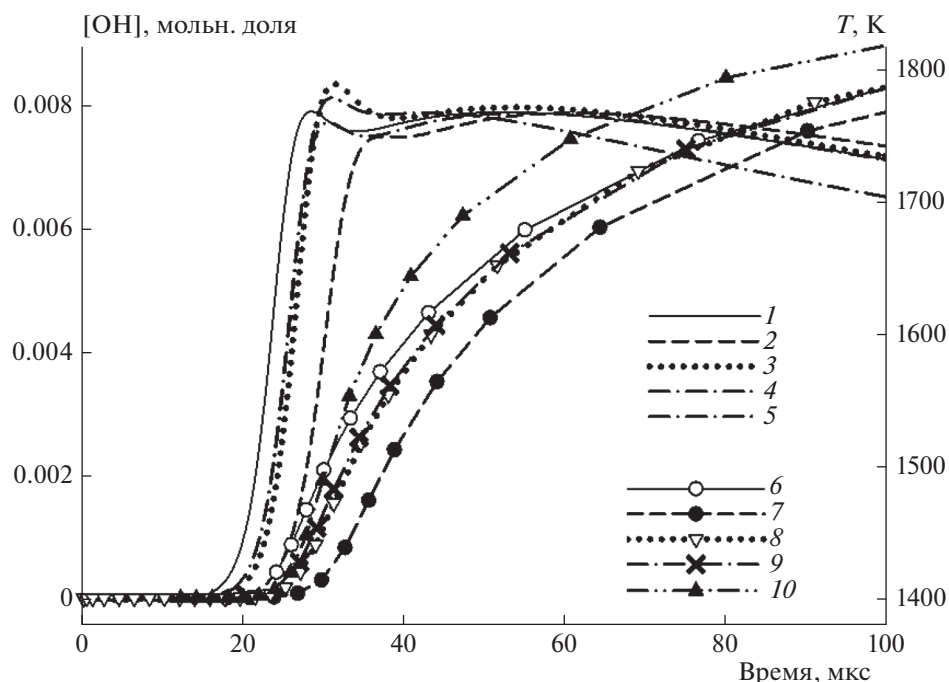


Рис. 3. Временные профили $[OH]$ (кривые без символов) и T (с символами) в процессе самовоспламенения смеси 6% H_2 с воздухом при $T_0 = 1400$ К и $P_0 = 1$ атм, рассчитанные по ДКМ из следующих работ: 1, 6 – [15]; 2, 7 – [16]; 3, 8 – [13]; 4, 9 – [14]; 5, 10 – [19].

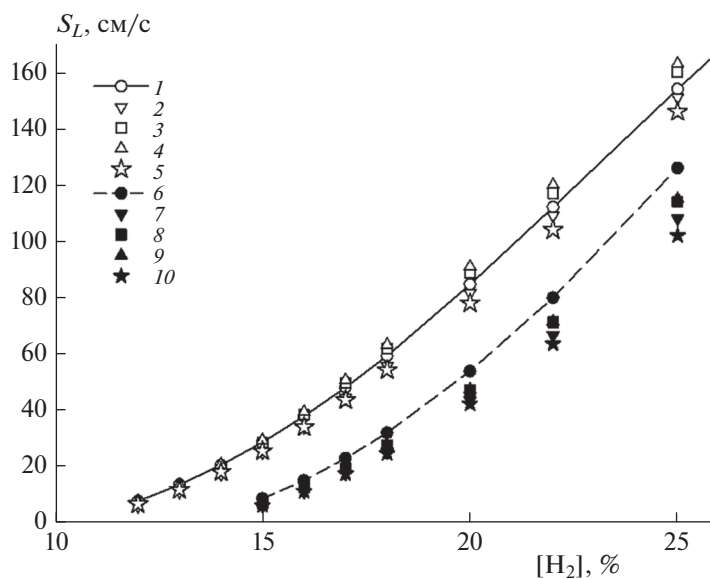


Рис. 4. Скорость ламинарного пламени S_L для бедных смесей H_2 –воздух при $T_0 = 298$ К. Светлые символы соответствуют $P_0 = 1$ атм, темные – $P_0 = 6$ атм. Расчеты по ДКМ из следующих работ: 1, 6 – [15]; 2, 7 – [16]; 3, 8 – [13]; 4, 9 – [14]; 5, 10 – [19].

РАСЧЕТ ЛАМИНАРНОЙ СКОРОСТИ ПЛАМЕНИ

Рисунок 4 демонстрирует результаты расчетов ламинарной скорости горения S_L для бедных смесей H_2 –воздух. Найти S_L для ультрабедных смесей с по-

мощью модуля PREMIX пакета CHEMKIN-Pro не представилось возможным. Поэтому расчеты велись для смесей водород–воздух в диапазонах концентраций H_2 12–25% и 15–25% при $P_0 = 1$ и 6 атм соответственно. Из рис. 4 видно, что расчеты S_L по всем ДКМ не различаются больше чем на

15% для $P_0 = 1$ атм и на 25% для $P_0 = 6$ атм. Наибольшее значение S_L для обоих давлений показывает ДКМ [19], наименьшее – ДКМ из работ [14] и [15] для $P_0 = 1$ и 6 атм соответственно. Следует учитывать, что экспериментальные измерения S_L имеют значительно больший разброс значений, чем наблюдается при расчетах по разным ДКМ [14, 19, 37, 52]. Поэтому с достаточной долей достоверности правомерно для расчетов параметра S_L использовать любой из представленных ДКМ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сравнение задержек воспламенения бедных и ультрабедных водородно-воздушных смесей, полученных с помощью расчетов по различным ДКМ, показало, что рассчитанные величины τ в температурном диапазоне от 800 до 1700 К при $P_0 = 1$ и 6 атм имеют в основном несущественные различия. Максимальные различия в значениях τ наблюдаются в области температур 900 и 1100 К соответственно для 1 и 6 атм. Анализ чувствительности показал, что основной вклад в определение τ вносят реакции взаимодействия атома Н с молекулой O_2 . При температурах выше 1250 К заметно отставание тепловыделения относительно достижения максимума концентрации промежуточных продуктов, что приводит к заметному росту температуры на временах, значительно больших τ . Расчеты нормальной скорости горения S_L показали близкие значения по расчетам по всем ДКМ. Учитывая, что экспериментальные данные по измерению τ и S_L , по которым проводилась апробация ДКМ, имеют разброс, больший, чем в расчетах, то при прогнозировании самовоспламенения и горения бедных и ультрабедных водородно-воздушных смесей при давлении ниже 6 атм с удовлетворительной степенью точности можно использовать любой из рассмотренных ДКМ.

Научно-исследовательская работа выполнена в рамках ФИЦ ХФ РАН № 122040500073-4.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Abou-Rjeily Y., C enerino G., Drozd A. et al.* IAEA–TECDOC–1661. Vienna, Austria: IAEA, 2011.
2. *Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Смыгалина А.Е.* // Вестн. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. “Естественные науки”. 2013. № 1. С. 89.
3. *Кириллов И.А., Харитонов Н.Л., Шарафутдинов Р.Б., Хренников Н.Н.* // Ядер. и радиац. безопасность. 2017. № 84. Т. 2. С. 26.
4. *Yakovenko I.S., Ivanov M.F., Kiverin A.D., Melnikova K.S.* // Intern. J. Hydrogen Energy. 2018. V. 43. P. 1894.
5. *Yakovenko I., Kiverin A. and Melnikova K.* // Fluids. 2021. V. 6. P. 21.
6. *Smith G.P., Golden D.M., Frenklach M. et al.* GRI-Mech 3.0. 1999; http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
7. *Saxena P., Williams F.A.* // Combust. and Flame. 2006. V. 145. P. 316.
8. *Konnov A.* // Ibid. 2008. V. 152. № 4. P. 507.
9. *Le Cong T., Dagaut P.* // Proc. Combust. Inst. 2009. V. 32. Issue 1. P. 427.
10. *Hong Z., Davidson D.F., Hanson R.K.* // Combust. and Flame. 2011. V. 158. № 4. P. 633.
11. *Shimizu K., Hibi A., Koshi M., Morii Y., Tsuboi N.* // J. Propulsion Power. 2011. V. 27. № 2. P. 383.
12. *Burke M.P., Chaos M., Ju Y., Dryer F.L., Klippenstein S.J.* // Intern. J. Chem. Kinet. 2012. V. 44. P. 444.
13. *Keromnes A., Metcalfe W.K., Heufer K.A. et al.* // Combust. and Flame. 2013. V. 160. P. 995.
14. *Alekseev V.A., Christensen M., Konnov A.A.* // Ibid. 2015. V. 162. P. 1884.
15. *Власов П.А., Смирнов В.Н., Тереза А.М.* // Хим. физика. 2016. Т. 35. № 6. С. 35.
16. *Smith G.P., Tao Y., Wang H.* Foundational Fuel Chemistry Model Version 1.0 (FFCM-1). 2016; <http://web.stanford.edu/group/haiwanglab/FFCM-1/index.html>
17. *Hedayatzadeh S.M., Soltanieh M., Fatehifar E., Heidarinassab A., Nasr M.R.J.* // J. Res. Ecology. 2016. V. 4. № 1. P. 137.
18. *Skrebkov O.V., Kostenko S.S., Smirnov A.L.* // Intern. J. Hydrogen Energy. 2020. V. 45. P. 3251.
19. *Zhang Y., Fu J., Xie M., Liu J.* // Ibid. 2021. V. 46. № 7. P. 5799.
20. *Hashemi H., Christensen J.M., Gersen S., Glarborg P.* // Proc. Combust. Inst. 2015. V. 35. P. 553.
21. *Hu E., Pan L., Gao Z. et al.* // Intern. J. Hydrogen Energy. 2016. V. 41. № 30. P. 13261.
22. *Baulch D.L., Bowman C.T., Cobos C.J. et al.* // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2005. V. 34. № 3. P. 757.
23. *Schonborn A., Sayad P., Konnov A.A., Klingmann J.* // Intern. J. Hydrogen Energy. 2014. V. 39. № 23. P. 12166.
24. *Павлов В.А., Герасимов Г.Я.* // Инж.-физ. журн. 2014. Т. 87. № 6. С. 1238.
25. *Франк-Каменецкий Д.А.* Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987.
26. *Petersen E.L., Kalitan D.M., Rickard M.J.A.* // Proc. 39th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conf. and Exhibit. Rep. AIAA 2003–4493. Huntsville, AL: AIAA, 2003.
27. *Davidson D.F., Hanson R.K.* // Intern. J. Chem. Kinetics. 2004. V. 36. № 9. P. 510.
28. *Masten D.A., Hanson R.K., Bowman C.T.* // J. Phys. Chem. 1990. V. 94. № 18. P. 7119.
29. *Michael J.V., Sutherland J.W., Harding L.B., Wagner A.F.* // Proc. Combust. Inst. 2000. V. 28. P. 1471.
30. *Li J., Zhao Z., Kazakov A., Dryer F.L.* // Intern. J. Chem. Kin. 2004. V. 36. № 10. P. 566.
31. *Мартыненко В.В., Пенязков О.Г., Рагомунов К.А., Шабуня С.И.* // Инж.-физ. журн. 2004. Т. 77. № 4. С. 100.
32. *Pang G.A., Davidson D.F., Hanson R.K.* // Proc. Combust. Inst. 2009. V. 32. P. 181.
33. *Mathieu O., Levacque A., Petersen E.L.* // Intern. J. Hydrogen Energy. 2012. V. 37. P. 15393.

34. *Mulvihill C.R., Petersen E.L.* // Proc. Combust. Inst. 2019. V. 37. P. 259.
35. *Aul C.J., Crofton M.W., Mertens J.D., Petersen E.L.* // Ibid. 2011. V. 33. P. 709.
36. *Dahoe A.E.* // J. Loss Prevention Process Industries. 2005. V. 18. P. 152.
37. *Смыгалина А.Е.* Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2018.
38. *Medvedev S.P., Agafonov G.L., Khomik S.V., Gelfand B.E.* // Combust. and Flame. 2010. V. 157. P. 1436.
39. *Weydahl T., Pooyarakkam M., Seljeskog M., Haugen N.E.L.* // Intern. J. Hydrogen Energy. 2011. V. 36. № 18. P. 12025.
40. *Olm C., Zsely I.G., Palvolgyi R. et al.* // Combust. and Flame. 2014. V. 161. № 9. P. 2219.
41. *Abagyan A.A., Adamov E.O., Burlakov E.V.* // Proc. IAEA Conf. (Intern.). IAEA-J4-TC972. Vienna, Austria: Springer, 1996. P. 46.
42. *Абрамов С.К., Азатян В.В., Баймуратова Г.Р. и др.* // Хим. физика. 2010. Т. 29. № 11. С. 50.
43. *Grune J., Sempert K., Haberstroh H., Kuznetsov M., Jordan T.* // J. Loss Prevention Process Industries. 2013. V. 26. P. 317.
44. CHEMKIN-Pro 15112. CK-TUT-10112-1112-UG-1. Reaction Design: San Diego, 2011.
45. *Burcat A., Ruscic B.* Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables. Argonne National Laboratory: Technion-Israel Institute of Technology. Tech. Rep. ANL-05/20 and TAE-960. IL, Chicago; Tel-Aviv, 2005.
46. *Гельфанд Б.Е., Попов О.Е., Медведев С.П. и др.* // ДАН. 1993. Т. 330. С. 457.
47. *Lewis B., von Elbe G.* Combustion, flames and explosions of gases. N.Y.: Acad. Press, 1961.
48. *Кузнецов Н.М.* Кинетика мономолекулярных реакций. М.: Наука, 1982.
49. *Семёнов Н.Н.* Цепные реакции. М.: Госхимтехиздат, 1934.
50. *Medvedev S.P., Agafonov G.L., Khomik S.V.* // Acta Astronautica. 2016. V. 126. P. 150.
51. *Киверин А.Д.* Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. М.: ОИВТ РАН, 2021.
52. *Alekseev V.* Dissertation... PhD. Lund, Sweden: Lunds Univ., 2015.

**ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ**

УДК 621.762

**ИНИЦИИРОВАНИЕ ГОРЕНИЯ ВОДОРОДОВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ
МЕТАЛЛИЧЕСКИМ РОДИЕМ И СМЕСЕЙ
ВОДОРОД–МЕТАН/ЭТАН/ЭТИЛЕН–ВОЗДУХ РОДИЕМ
И ПАЛЛАДИЕМ ПРИ ДАВЛЕНИЯХ 1–2 АТМ****© 2022 г. К. Я. Трошин^{1*}, Н. М. Рубцов², Г. И. Цветков²,
В. И. Черныш², И. О. Шамшин¹**¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук,
Москва, Россия²Институт структурной макрокинетики и материаловедения Российской академии наук, Черноголовка, Россия

*E-mail: troshin@chph.ras.ru

Поступила в редакцию 25.10.2021;

после доработки 23.11.2021;

принята в печать 21.12.2021

Экспериментально определены температуры воспламенения и эффективные энергии активации смесей (5÷40% H₂ – воздух над поверхностью металлического родия и стехиометрических смесей 70% H₂ + 30% метана и (30÷70%) H₂ + (70÷30%) этана (или этилена) с воздухом над поверхностями родия и палладия при давлениях 1–2 атм и начальной температуре 20–300°C. Было показано, что поверхность металлического родия является более эффективным катализатором данных процессов горения, чем поверхность металлического палладия; величины эффективных энергий активации воспламенения зависят не только от природы катализатора, но и от химической природы углеводорода в исследуемой смеси. Полученные данные указывают на то, что каталитическое воспламенение инициируется экзотермической поверхностной реакцией окисления водорода в присутствии катализатора, углеводород на поверхности расходуется в реакциях с участием промежуточных продуктов окисления водорода, не приводящих к разветвлению цепей, и затем горение переходит в объем. Установлено, что в не обработанном воспламенениями исследуемой смеси реакторе температура воспламенения смеси 70% H₂ + 30% метана с воздухом над поверхностью палладия при давлении 1.75 атм составляет 310°C, а над поверхностью родия – 105°C. В обработанном воспламенениями реакторе температура воспламенения смеси 70% H₂ + 30% метана с воздухом над поверхностью палладия при давлении 1.75 атм составляет 270°C, а над поверхностью родия – 62°C. Полученный результат указывает на перспективность использования родиевого катализатора для существенного понижения температуры воспламенения топлив на основе метана и водорода.

Ключевые слова: зажигание, пламя, горение, водородовоздушная смесь, водородно-этановая/этилен-воздушная смесь, палладий, родий, высокоскоростная цветная съемка.

DOI: 10.31857/S0207401X22080131**ВВЕДЕНИЕ**

Для широкого использования водорода в качестве топлива в “зеленой” энергетике необходимо решить ряд проблем по безопасности производства, транспортировке и хранению водорода. Одной из основных проблем является нештатное воспламенение, поскольку водород имеет гораздо более широкие концентрационные пределы воспламенения, чем углеводороды, обычно используемые в качестве топлив [1]. Одним из возможных источников воспламенения является горячая поверхность. Таким образом, необходимо иметь возможность предотвращать или надежно контролировать условия, при которых смесь водоро-

да и окислителя контактирует с горячей поверхностью, особенно если поверхность обладает каталитическими свойствами.

Каталитическое горение водорода представляет интерес, поскольку устройства, например котлы, использующие этот принцип, работают при относительно низких температурах и могут генерировать тепло для бытовых приложений без выбросов CO₂ и NO_x [2]. В реакции горения водорода катализаторы должны обладать термической стабильностью, а также должны быть обеспечены условия, при которых окисление водорода происходило без взрыва. Эти требования могут быть удовлетворены при использовании благородных

металлов, которые, кроме того, эффективно поглощают H_2 и O_2 при сравнительно низких температурах [3].

В качестве альтернативы наряду с водородом повышенное внимание привлекают более безопасные смесевые водородно-углеводородные топлива, концентрационные пределы воспламенения которых существенно уже, чем в случае водорода. Поэтому горение этих топлив позволит удовлетворить современную потребность в ограничении выбросов NO_x в производстве энергии, в том числе в двигателях внутреннего сгорания [4–6].

Благородные металлы по-разному влияют на воспламеняемость горючих газов и их смесей. Мы ранее показали, что температура зажигания смеси $40\%H_2$ – воздух над металлическим Pd ($70^\circ C$, 1 атм) на $\sim 200^\circ C$ меньше, чем над поверхностью Pt ($260^\circ C$, 1 атм) [6], т.е. Pd каталитически более эффективен, чем Pt. Таким образом, Pd более удобен для использования в рекомбинаторах водорода на АЭС в том числе и потому, что в газовой фазе не появляются образованные при разложении летучего оксида каталитические частицы металла в качестве центров зажигания, как это имеет место в случае Pt [7]. Экспериментальное значение эффективной энергии активации каталитического воспламенения водорода над Pd составляет ~ 3.5 ккал/моль, что характерно для поверхностных процессов [6]. Это указывает на заметную роль темновой каталитической реакции окисления водорода, называемой также “беспламенным горением”, которое наблюдается при низких давлениях [8]. Осуществление такой реакции снижает вероятность нештатного воспламенения за счет расходования водорода и, соответственно, выхода смеси из области воспламенения.

Горение водорода над поверхностями Rh, Ru, Pd и Pt при общих давлениях до 200 Торр и начальных температурах до $500^\circ C$ исследовали в работе [9] с целью установления как зависимостей пределов каталитического воспламенения над поверхностями благородных металлов от температуры, так и управляющих факторов процесса зажигания газа каталитической поверхностью. Было показано, что Rh является наиболее эффективным катализатором воспламенения $2H_2 + O_2$, при этом самая низкая температура зажигания наблюдается при использовании Rh и составляет $210^\circ C$, для Ru и Pd – $300^\circ C$, для Pt – $410^\circ C$.

В работах [10, 11] показано, что при горении смесей ($70\div 40\%$) водорода + ($30\div 60\%$) пропана с воздухом (коэффициент избытка горючего $\phi = 1$) над палладием при общих давлениях 1–2 атм периоды задержки воспламенения (τ) сначала уменьшаются с понижением температуры, а затем увеличиваются, до тех пор пока не достигается предел каталитического воспламенения, т.е. наблюдается

явление отрицательного температурного коэффициента (ОТК). Эффективная энергия активации процесса составляет $E_{ef} = (2.2 \pm 1.0)$ ккал/моль, что характерно для поверхностного процесса. Таким образом, явление ОТК непосредственно связано с состоянием поверхности катализатора.

В работе экспериментально определены значения температуры воспламенения и эффективных энергий активации воспламенения смесей ($5\div 40\%$) H_2 – воздух над поверхностью металлического родия и стехиометрических смесей $70\% H_2 + 30\%$ метана и ($30\div 70\%$) $H_2 + (70\div 30\%)$ этана (или этилена) с воздухом над поверхностями родия и палладия при давлениях 1–2 атм и начальной температуре $20\text{--}300^\circ C$ в статических условиях с целью сравнения каталитической эффективности Rh и Pd, установления факторов, определяющих закономерности инициирования каталитического воспламенения и выяснения наличия ОТК при воспламенении водорода над Rh.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Эксперименты проводили с газовыми смесями ($5\div 40\%$) H_2 – воздух над поверхностью металлического родия и стехиометрических (стехиометрический состав рассчитывали для суммы топлив) смесей $70\% H_2 + 30\%$ метана и ($30\div 70\%$) $H_2 + (70\div 30\%)$ этана (или этилена) с воздухом над поверхностями родия и палладия при давлениях 1–2 атм и начальной температуре $20\text{--}300^\circ C$ в статических условиях. Использовали нагреваемый цилиндрический реактор из нержавеющей стали длиной 25 см и диаметром 12 см, снабженный съемными крышками и оптическим сапфировым окном в одной из крышек [8]. Точность измерения температуры составляла $0.3^\circ C$. Регистрацию воспламенения и распространения пламени осуществляли с помощью цветной высокоскоростной камеры Casio Exilim F1 Pro (Japan) с частотой кадров – 600 с^{-1} . Видеофайл сохраняли в памяти компьютера и затем проводили его покадровую обработку [10, 11]. Откачанный и нагретый реактор быстро заполняли газовой смесью из буферного объема высокого давления до необходимого давления. Для открытия и закрытия газовых коммуникаций использовали электромагнитный клапан. Давление в процессе напуска газа и горения регистрировали прецизионным датчиком давления “Карат-ДИ” (Россия). Для осуществления термического/каталитического зажигания использовали палладиевую проволоку толщиной 0.3 мм и длиной 80 мм, а также образец Rh, который был получен путем электрохимического осаждения слоя Rh толщиной 15 мкм на эту проволоку. Палладий был выбран, так как его коэффициент теплового расширения наиболее близок к Rh [12]. Проволоки из Pd или Rh/Pd использовали для воспламе-

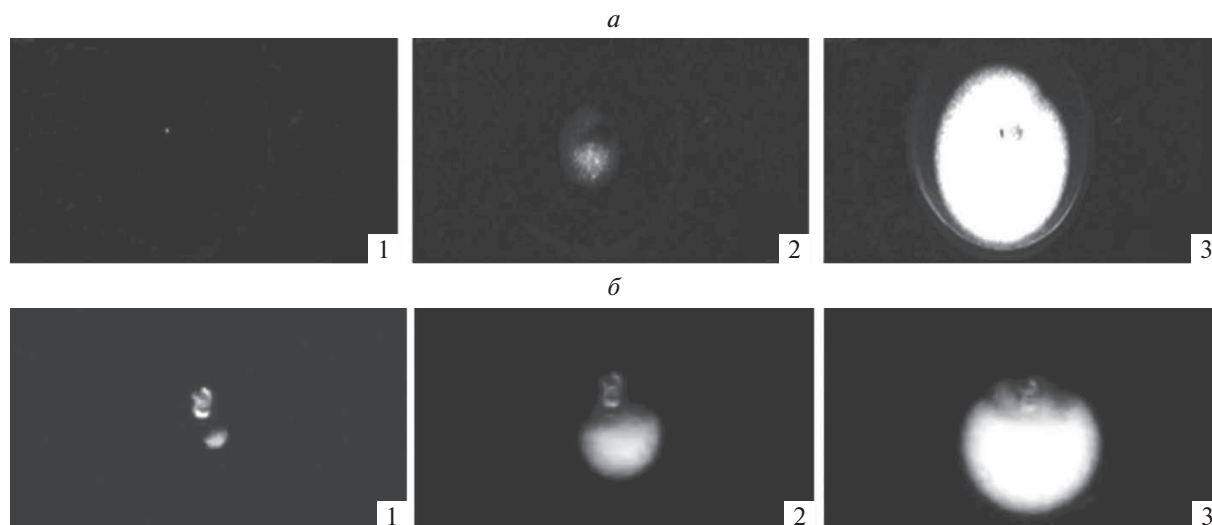


Рис. 1. Последовательность кадров высокоскоростной съемки (600 c^{-1}) каталитического воспламенения смесей $40\% \text{ H}_2 + \text{воздух}$ (а) над поверхностью родия при $T_0 = 80^\circ\text{C}$, $P_0 = 1.7 \text{ атм}$ и $70\% \text{ H}_2 + 30\% \text{ CH}_4 + \text{воздух}$ (б) над той же поверхностью при тех же значениях T_0 и P_0 (все кадры на рис. 1б увеличены в 4 раза по сравнению с рис. 1а). Первый кадр соответствует моменту возникновения первичного очага воспламенения.

нения газовой смеси; при этом температуру проволоки измеряли, включая ее в качестве плеча в цепь моста Уитстона и калибра предварительно по температуре. Перед каждым экспериментом реактор откачивали до 0.1 Торр . Верхний предел каталитического воспламенения определяли как среднее значение двух температур при заданном давлении при подходе со стороны низких температур в не обработанном воспламенениями сосуде: при более низкой температуре воспламенение отсутствовало, при более высокой – воспламенение происходило. Нижний предел каталитического воспламенения определяли аналогично, но при “подходе” со стороны высоких температур в обработанном воспламенениями сосуде. Общее давление в реакторе контролировали с помощью образцового вакуумметра, а давление в буферном объеме – с помощью образцового манометра. Использовали химически чистые газы и Pd чистотой 99.85% .

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Эксперименты по высокоскоростной регистрации каталитического воспламенения на примере смеси $40\% \text{ H}_2 - \text{воздух}$ и стехиометрической смеси ($70\% \text{ H}_2 + 30\% \text{ CH}_4$) – воздух над поверхностью проволоки из Rh/Pd показали, что первичный центр воспламенения возникает у поверхности металла (рис. 1); в последующих экспериментах в тех же условиях место возникновения первичного центра воспламенения изменялось. Такое же изменение места локализации первич-

ного центра мы наблюдали ранее при воспламенении над поверхностью платины [6, 7, 9].

Таким образом, воспламенение над поверхностью благородного металла связано с реакциями адсорбированных активных центров на поверхности, поведение которых определяется как поверхностными дефектами с избытком свободной энергии, так и природой катализатора. Воспламенение включает стадии прогрева, локального зажигания и распространения пламени. Химическая активность различных участков поверхности изменяется от одного воспламенения к другому.

Зависимости температуры разогрева проволоки из Rh/Pd от времени при каталитически инициированном воспламенении смеси $40\% \text{ H}_2 - \text{воздух}$ при $P_0 = 1.75 \text{ атм}$ и $T_0 = 98, 80, 68^\circ\text{C}$ представлены на рис. 2. Эти зависимости соответствуют последовательным значениям температуры, при которых горячая смесь напускается в обработанный воспламенениями реактор ниже верхнего предела каталитического воспламенения, измеренного в не обработанном сосуде при “подходе” снизу вверх по температуре (при более низких температурах воспламенение не происходит, при более высоких воспламенение наблюдается) [10]. Таким образом, в этой серии опытов первое воспламенение соответствует превышению верхнего предела каталитического воспламенения, осциллограммы второго и третьего воспламенений приведены на рис. 2. Как видно из этого рисунка, периоды задержки воспламенения τ сначала уменьшаются с понижением температуры. Затем значения τ увеличиваются, пока не достигается нижний предел каталитического воспламенения (при более вы-

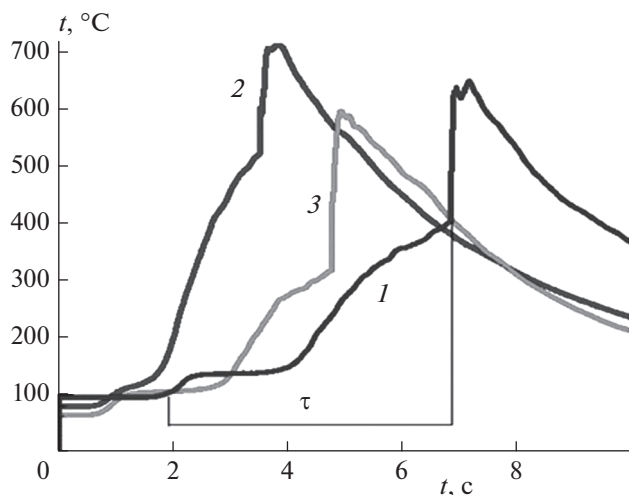


Рис. 2. Изменение температуры разогрева проволоки Rh/Pd при воспламенении смеси 40% H_2 + воздух; при следующих значениях T_0 : 1 – 98°C, 2 – 80°C, 3 – 68°C; $P = 1.75$ атм; время задержки воспламенения (τ) показано на рисунке.

соких температурах происходит воспламенение, при более низких воспламенение отсутствует). Напомним, что нижний предел каталитического воспламенения соответствует поверхности реактора или поверхности катализатора, обработанной воспламенениями; верхний предел каталитического воспламенения соответствует “свежему” реактору, в котором до этого не происходило воспламенений. Таким образом, над поверхностью родия мы наблюдаем явление отрицательного температурного коэффициента, подобное описанному в работе [10]. Явление ОТК, очевидно, вызвано изменением состояния поверхности родия. Как показано в работе [9], в образцах, обработанных зажиганиями, проявляются дефекты в виде отверстий (см. рис. 5 из [9]), располагающихся на фигурах травления. В реакциях травления, очевидно, участвуют активные промежуточные продукты окисления водорода.

Чтобы выявить влияние химической природы как катализатора (Pd и Rh/Pd), так и углеводорода на поверхностные процессы, использовали газы метан, этилен и этан в смесях с водородом и экспериментально измеряли температурные зависимости концентрации водорода на нижнем пределе каталитического воспламенения. В данной работе приводится наиболее практически важный результат по воспламенению смесей водород–метан–воздух. Он заключается в том, что в не обработанном воспламенениями исследуемой смеси реакторе температура воспламенения смеси 70% H_2 + 30% метана с воздухом над поверхностью палладия при давлении 1.75 атм составляет 310°C, а над поверхностью родия – 105°C (верхний предел каталитического воспламенения). В обра-

ботанном воспламенениями реакторе температура воспламенения смеси 70% H_2 + 30% метана с воздухом над поверхностью палладия при давлении 1.75 атм составляет 270°C, а над поверхностью родия – 62°C (нижний предел каталитического воспламенения), т.е. родиевый катализатор обеспечивает снижение как нижнего, так и верхнего пределов каталитического воспламенения в разы по сравнению с палладием. Полученный результат, требующий дальнейших исследований, указывает на перспективность использования родиевого катализатора для существенного понижения температуры воспламенения топлив на основе метана и водорода.

Экспериментальные зависимости температуры на нижних пределах каталитического воспламенения для стехиометрических смесей H_2 –этан–воздух (темные кружки) и H_2 –этилен–воздух (светлые кружки) над поверхностью Pd от содержания H_2 в смеси при 1.7 атм представлены на рис. 3а. На рис. 4а представлены зависимости нижних пределов каталитического воспламенения над поверхностями Pd и Rh/Pd от содержания H_2 в смесях: H_2 –воздух над Rh/Pd (темные кружки), H_2 –воздух над Pd (квадраты), H_2 –этилен–воздух над Rh/Pd (светлые кружки) при $P_0 = 1.7$ атм.

Из рис. 3а видно, что смесь H_2 –этан–воздух воспламеняется при более низких температурах, чем смесь H_2 –этилен–воздух, т.е. этан более эффективно взаимодействует с активными центрами на каталитической поверхности палладия. Рисунок 4а показывает, что поверхность Rh/Pd воспламеняет смесь H_2 –воздух при более низких температурах, чем поверхность Pd. Этот результат согласуется с рис. 4 из работы [9], где установлено, что Rh является наиболее активной поверхностью при катализе реакции $H_2 + O_2$, а поверхности Ru и Pd менее активны при общих давлениях <200 Торр. Следует отметить, что при давлениях >1 атм и последовательных каталитических воспламенениях смесей H_2 –углеводород–воздух над поверхностью Rh/Pd вблизи нижнего предела каталитического воспламенения при тех же условиях период задержки воспламенения увеличивается, т.е. нижний предел каталитического воспламенения увеличивается. Это можно предотвратить путем каталитического воспламенения смеси 40% H_2 –воздух перед каждым каталитическим воспламенением смесей H_2 –углеводород–воздух. Как указано выше, изменение каталитической активности благородного металла определяется изменением состояния его поверхности. Таким образом, поверхность родия более эффективно ингибируется (травится) углеводородом, чем поверхность палладия; этот углеводород удаляется с поверхности при ее обработке воспламенением смеси H_2 –воздух.

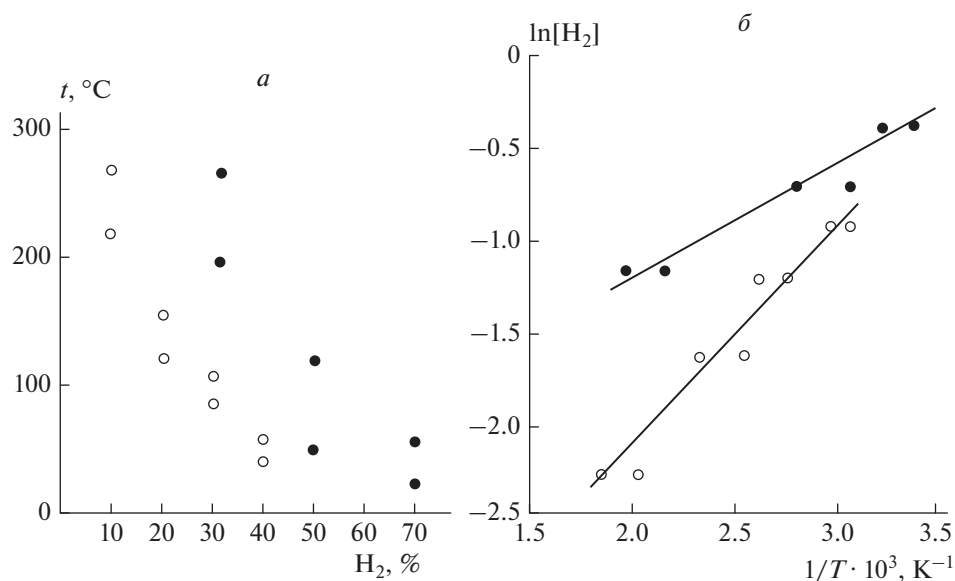


Рис. 3. *a* – Экспериментальные зависимости температуры на нижнем пределе каталитического воспламенения на поверхности Pd от содержания H_2 в смеси: ● – смесь H_2 –этан–воздух, ○ – смесь H_2 –этилен–воздух; *б* – эти же зависимости в координатах Аррениуса. Эффективные энергии активации E_{ef} : горючее H_2 –этан – (1.25 ± 0.50) ккал/моль; горючее H_2 –этилен – (2.8 ± 1.0) ккал/моль.

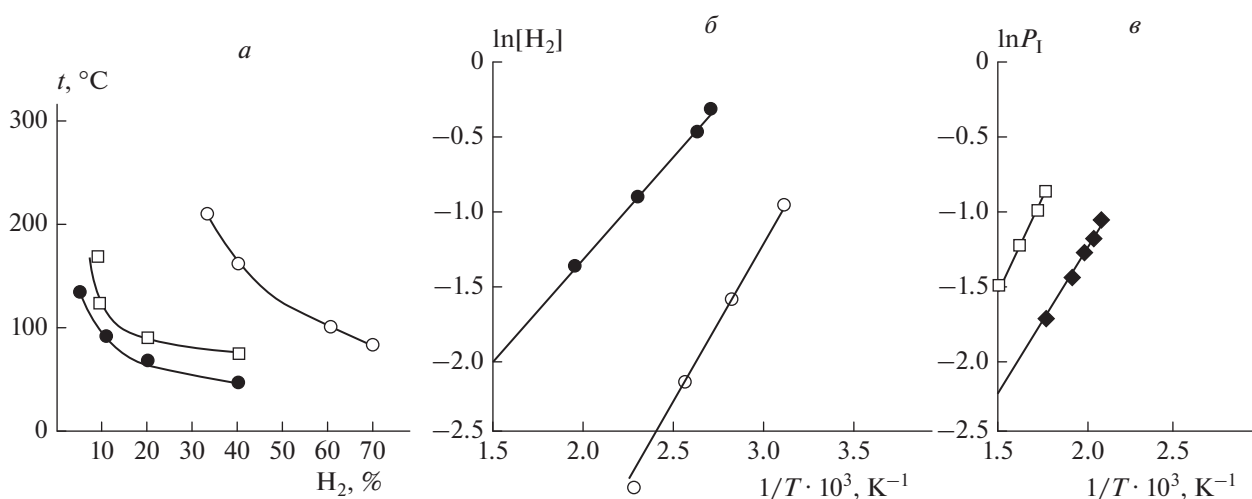


Рис. 4. *a* – Экспериментальные зависимости температуры на нижнем пределе каталитического воспламенения на поверхностях Pd и Rh/Pd от содержания H_2 в смеси: ● – смесь H_2 –воздух над Rh/Pd, □ – смесь H_2 –воздух над Pd, ○ – смесь H_2 –этилен–воздух над Rh/Pd при $P_0 = 1.7$ атм; *б* – аррениусовские зависимости содержания H_2 в смеси на нижнем пределе каталитического воспламенения от температуры на поверхности Rh/Pd: ● смесь – H_2 –этилен–воздух, $E_{ef} = (2.4 \pm 1.0)$ ккал/моль; ○ – смесь 40% H_2 –воздух, $E_{ef} = (3.5 \pm 1.1)$ ккал/моль; *в* – аррениусовские зависимости нижнего предела воспламенения (P_1) смесей $2H_2 + O_2$ (рис. 6, 7 из [9]) от температуры: □ – над Pd, $E_{ef} = (3.9 \pm 1.0)$ ккал/моль; ◆ – над Rh/Pd, $E_{ef} = (3.6 \pm 1.1)$ ккал/моль.

Зависимости содержания водорода в исследованных смесях от температуры на нижнем пределе каталитического воспламенения в координатах Аррениуса представлены на рис. 3б и 4б. Величины эффективной энергии активации берутся из тангенсов углов наклона прямых на этих рисунках. Укажем также, что в качестве значения

концентрации в $\ln[H_2]$ на рис. 3б и 4б берется доля водорода, а не проценты, как на рис. 3а. Как видно из этих рисунков, эти зависимости аппроксимируются прямыми линиями (коэффициенты корреляции ≥ 0.98). Данные обрабатывали с помощью программного пакета Statistica 9 (Statsoft). Приведенное в работе [6] обоснование использо-

вания таких координат основано на том, что в отсутствие водорода в смесевом горючем воспламенение в присутствии катализатора в использованном в работе интервале давлений и температур не происходит; именно процесс окисления водорода обеспечивает нагрев катализатора за счет поверхностной экзотермической реакции.

Из рис. 3б видно, что эффективная энергия активации нижнего предела каталитического воспламенения смеси H_2 –этан–воздух составляет (1.25 ± 0.5) ккал/моль; она заметно меньше значения аналогичного параметра для смеси H_2 –этилен–воздух (2.8 ± 1.0) ккал/моль, т.е. при каталитическом воспламенении углеводороды на поверхности расходуются каждый по своему специфическому механизму [13]. Для обеспечения воспламенения должна быть реализована совокупность реакций (звено цепи), в которых происходит разветвление (увеличение числа свободных валентностей) [6]. Активированная ($E = 16.7$ ккал/моль [14]) гомогенная реакция разветвления $H + O_2 \rightarrow O + OH$ является самой медленной стадией в звене цепи окисления водорода. Следовательно, энергия активации разветвления должна определять температурную зависимость всего процесса, как это наблюдается в аналогичных экспериментах с поверхностью металлической платины [15]. Это означает, что в случае каталитической поверхности Pd некоторые стадии, входящие в цикл реакций, приводящих к разветвлению, имеют гетерогенную природу [9], поскольку эффективная энергия активации составляет < 3 ккал/моль. Таким образом, полученные в работе экспериментальные данные указывают на то, что каталитическое воспламенение инициируется экзотермической поверхностной реакцией окисления водорода в присутствии катализатора, углеводород на поверхности расходует в реакциях с участием промежуточных продуктов окисления водорода, не приводящих к разветвлению цепей, и затем горение переходит в объем.

На рис. 4б приведены зависимости Аррениуса логарифма доли H_2 в смеси на нижнем пределе каталитического воспламенения от обратной температуры на поверхности Rh/Pd для смеси H_2 –этилен–воздух. Величина эффективной энергии активации составляет (2.4 ± 1.0) ккал/моль. Эта величина меньше, чем при воспламенении над Pd, что указывает на большую каталитическую эффективность родия по сравнению с палладием.

Величина эффективной энергии активации в аррениусовских координатах на нижнем пределе каталитического воспламенения на поверхности Rh/Pd для смеси H_2 –воздух составляет (3.5 ± 1.1) ккал/моль (рис. 4в). Эта величина близка к значению, взятому из зависимости Аррениуса для нижнего предела по давлению каталитического воспламенения смеси $2H_2 + O_2$ над

Rh/Pd: (3.6 ± 1.1) ккал/моль (рис. 6 из [9]). Величина эффективной энергии активации, определенная для нижнего предела каталитического воспламенения по давлению смеси $2H_2 + O_2$ над Pd (3.9 ± 1.0) ккал/моль, рис. 6 из [9]), также удовлетворительно согласуется со значением, полученным из зависимости Аррениуса для смеси $2H_2 + O_2$ над Pd: $\sim(3.5 \pm 1.1)$ ккал/моль [6] (рис. 4в). Полученные значения эффективной энергии активации взаимно согласуются и свидетельствуют в пользу поверхностной природы отдельных реакций, входящих в процесс разветвления на поверхности Rh, как мы предположили ранее в работе [9]; при этом Rh более каталитически активен, чем Pd.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Установлено, что Rh является более эффективным катализатором изученных процессов горения, чем Pd. Величины эффективных энергий активации каталитического воспламенения зависят не только от природы катализатора, но и от химической природы углеводорода в смеси. Таким образом, каталитическое воспламенение инициируется экзотермической поверхностной реакцией окисления водорода в присутствии катализатора, углеводород на поверхности расходует в реакциях с участием промежуточных продуктов окисления водорода, не приводящих к разветвлению цепей, затем горение переходит в объем.

Установлено, что в не обработанном воспламенениями реакторе температура воспламенения смеси 70% H_2 + 30% метана с воздухом над поверхностью Pd при давлении 1.75 атм составляет $310^\circ C$, а над поверхностью Rh – $105^\circ C$. В обработанном воспламенениями реакторе температура воспламенения этой смеси над поверхностью Pd при давлении 1.75 атм составляет $270^\circ C$, а над поверхностью Rh – $62^\circ C$. Полученный результат указывает на перспективность использования родиевого катализатора для понижения температуры воспламенения топлив на основе метана и водорода.

В части изучения горения над поверхностью металлических родия и палладия при использовании скоростной цветной киносъемки работа выполнена в рамках госзадания АААА-А17-117011910011-09 и в рамках госзадания ИСМАН; в части изучения горения смесей водород–метан–воздух – в рамках госзаданий ФИЦ ХФ РАН № 0082 (регистрационный номер АААА-А21-121011990037-8) и ИСМАН (регистрационный номер АААА-А19-119010990034-5).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lewis B., Von Elbe G. Combustion, Explosions and Flame in Gases. New York, London: Acad. Press, 1987.

2. *Persson K., Pfefferle L.D., Schwartz W., Ersson A., Jaras S.G.* // Appl. Catal. B: Environmental. 2007. V. 74. P. 242.
3. *Fernández A., Arzac G.M., Vogt U.F. et al.* // Appl. Catal. B. 2016. V. 180. P. 336.
4. *Cho E.-S., Chung S.H.* // J. Mech. Sci. Technol. 2009. V. 23. P. 650.
5. *Razali H., Sopian K., Mat S.* // ARPN J. Eng. Appl. Sci. 2015. V. 10. P. 7780.
6. *Борисов А.А., Рубцов Н.М., Скачков Г.И., Трошин К.Я.* // Хим. физика. 2012. Т. 31. № 8. С. 30.
7. *Трошин К.Я., Рубцов Н.М., Цветков Г.И., Черныш В.И.* // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 1. С. 23.
8. *Рубцов Н. М., Виноградов А. Н., Калинин А. П. и др.* // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 4. С. 53.
9. *Rubtsov N.M., Tsvetkov G.I., Chernysh V.I., Troshin K.Ya.* // Combust. and Flame. 2020. V. 218. P. 179.
10. *Борисов А.А., Кнорре В.Г., Кудряшова Е.Л., Скачков Г.И., Трошин К.Я.* // Хим. физика. 1998. Т. 17. № 7. С. 80.
11. *Калинин А.П., Рубцов Н.М., Виноградов А.Н. и др.* // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 2. С.23.
12. Engineering ToolBox, Coefficients of Linear Thermal Expansion, 2003, https://www.engineeringtoolbox.com/linear-expansion-coefficients-d_95.html
13. *Репинский С.М.* Введение в химическую физику поверхности твердых тел. Новосибирск: Наука; Сиб. изд. фирма, 1993.
14. *Семенов Н.Н.* О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. М.: АН СССР, 1958.
15. *Родионов И.Д., Рубцов Н.М., Виноградов А.Н. и др.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 8. С. 82.

**ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ**

УДК 533.6.011.5

**ИНИЦИИРОВАНИЕ СТАБИЛЬНОГО ДЕТОНАЦИОННОГО ГОРЕНИЯ
ПАРОВ КЕРОСИНА ЗА НАКЛОННОЙ УДАРНОЙ ВОЛНОЙ В УСЛОВИЯХ
РАЗРЕЖЕННОЙ АТМОСФЕРЫ**© 2022 г. Ю. В. Туник^{1*}, Г. Я. Герасимов¹, В. Ю. Левашов¹, В. О. Майоров¹, М. С. Ассад²¹Институт механики Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия²Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова Национальной Академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

*E-mail: tunik@imec.msu.ru

Поступила в редакцию 11.01.2022;

после доработки 15.02.2022;

принята в печать 21.02.2022

Рассматривается семейство осесимметричных сопел Лаваля с центральной цилиндрической частью, диффузор которых при сравнительно небольших габаритах обеспечивает стабильное детонационное горение паров керосина за наклонным ударным фронтом, формирующимся перед входом в камеру сгорания без вспомогательных иницирующих конструкций и дополнительного подвода энергии. Моделирование проводится на основе двумерных нестационарных уравнений движения Эйлера для осесимметричных течений многокомпонентного газа и упрощенной кинетической схемы химических превращений. Расчеты выполнены с использованием модифицированной численной схемы С.К. Годунова второго порядка точности по пространственным переменным. Показано, что эффективному детонационному горению соответствует попадание иницирующего ударного фронта на стенку камеры сгорания в непосредственной близости от угловой точки сопряжения с диффузором. Определены параметры ряда сопел, в которых детонационное горение паров керосина обеспечивает высокие силовые характеристики при коэффициенте полезного действия более 40% в условиях атмосферного воздуха на высоте порядка 40 км при полетном числе Маха $M_0 = 9$.

Ключевые слова: наклонная ударная волна, пары керосина, гиперзвуковая скорость, детонационное горение, сопло Лаваля, камера сгорания, тяга, коэффициент полезного действия.

DOI: 10.31857/S0207401X22080155

ВВЕДЕНИЕ

В сверхзвуковом прямоточном воздушно-реактивном двигателе (ПВРД) обычное горение энергетически более эффективно, чем детонационное, в предположении о возможности изоэнтропического торможения сверхзвукового потока практически до нулевой скорости, что, строго говоря, возможно только в конвергентно-дивергентном сопле с бесконечно большим поперечным сечением в точке остановки потока [1]. Но даже в этом предположении преимущество дефлаграции становится пренебрежимо малым при высоких значениях числа Маха (M), что показано на примере водородовоздушной смеси [2].

При детонационном горении поток замедляется только до некоторой сверхзвуковой скорости, сравнимой по порядку со скоростью распространения детонационной волны в набегающем потоке воспламеняющейся смеси. Сравнительно высокой может оставаться скорость газа, поступающего в прямоточную камеру сгорания с вращающейся детонацией (см., например, работы

[3–5]). Нет необходимости в сильном замедлении потока и в случае иницирования стабильного детонационного горения в каналах с препятствиями или в соплах с центральным затупленным телом, когда иницирование происходит за отошедшей ударной волной в результате преобразования части кинетической энергии набегающего сверхзвукового потока в тепловую. При этом, однако, часть теплоты сгорания топлива расходуется не на тягу, а на работу по преодолению аэродинамического сопротивления затупленного центрального тела. В случае, например, сжигания паров керосина в смеси с атмосферным воздухом указанные потери могут снижать генерируемую силу тяги на десятки процентов [6–8]. С повышением скорости набегающего потока эти потери растут из-за необходимости увеличения радиуса затупленного тела для удержания детонационной волны.

Значительно уменьшить потери позволяет использование наклонных детонационных волн, формирование которых, как правило, предпола-

Таблица 1. Относительный радиус и длина диффузора Буземана для различных чисел Маха M_s за скачком (число Маха набегающего потока $M_1 = 9$)

| M_s | M_N | R/r_0 | L/r_0 | T_s/T_0 | p_s/p_0 |
|-------|--------|---------|---------|-----------|-----------|
| 2.5 | 1.7054 | 10.281 | 95.741 | 7.6373 | 1050.7 |
| 3.0 | 1.6142 | 8.2845 | 78.506 | 6.1379 | 509.8 |
| 4.0 | 1.4510 | 5.3623 | 53.438 | 4.0905 | 130.75 |
| 4.5 | 1.3784 | 4.3597 | 44.920 | 3.4040 | 70.11 |

гает размещение в потоке клиновидных или конусообразных тел [9–11]. Исключением является течение в диффузоре Буземана (см., например, работу [12]). Осесимметричный сверхзвуковой поток замедляется в центрированной волне сжатия изоэнтропически до косоугольного скачка уплотнения, после которого формируется однородный поток, направленный вдоль оси симметрии. При достаточно высокой интенсивности этот косой скачок уплотнения может служить ударной волной, инициирующей детонационное горение. Однако расчеты показывают, что при высоких значениях числа Маха набегающего потока диффузор Буземана имеет относительно большие радиусы входа и длины. Для примера в табл. 1 представлены отношения радиуса входа R и длины диффузора L к радиусу r_0 потока за косым скачком уплотнения при торможении набегающего потока модельного газа с постоянным показателем адиабаты $k = 1.4$ и числом Маха $M_1 = 9$ до числа Маха за скачком $M_s = 2.5, 3, 4, 5$. Размеры диффузора уменьшаются с увеличением конечного числа Маха M_s . Одновременно снижается интенсивность косоугольного скачка уплотнения, т.е. число Маха M_N по нормали, а также перепады температуры T_s/T_0 и давления p_s/p_0 . Низкие значения температуры T_0 и давления p_0 набегающего потока затрудняют инициирование наклонной детонации в малогабаритных соплах с диффузором Буземана на больших высотах. Кроме того, реализация волны Буземана требует высокой точности построения диффузора.

В данной работе определяется форма сравнительно компактного диффузора для осесимметричного сопла Лавалья, которая обеспечивает детонационное горение паров керосина за наклонным ударным фронтом, формирующимся без вспомогательных конструкций перед входом в центральную цилиндрическую часть сопла в условиях атмосферного воздуха на высоте порядка 40 км при полетном числе Маха $M_0 = 9$.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ О ДЕТОНАЦИОННОМ ГОРЕНИИ ПАРОВ КЕРОСИНА В СОПЛЕ ЛАВАЛЯ

Альтернативой диффузору Буземана может служить конвергентная часть осесимметричного сопла Лавалья, контур которой задается выпуклой синусоидой, как это показано на рис. 1. На этом и приведенных ниже рисунках все расстояния и длины отнесены к радиусу r_0 центральной цилиндрической части сопла Лавалья, которая в ПВРД играет роль камеры сгорания. Сопряжение диффузора с камерой сгорания происходит в угловой точке V . Дивергентная часть сопла Лавалья задается в виде степенной функции синусоиды, показатель которой определяется положением точки перегиба Z , и гладко сопрягается с центральной частью сопла. Сопло имеет равные радиусы на выходе и входе: $R_2 = R_1$, где касательные к контуру параллельны оси симметрии. В расчетах длина центральной части сопла равна 4, дивергентной — 22. Расстояние от центральной части сопла до точки перегиба Z равно 6. За срезом сопла расчет продолжается на расстоянии, равном 4.

Задача о детонационном горении паров керосина, поступающих вместе с атмосферным воздухом со сверхзвуковой скоростью в сопло Лавалья, рассматривается в двух постановках. В одном случае в качестве начального используется однородное распределение параметров потока как во внутреннем, так и во внешнем течении. При этом считается, что вне сопла пары керосина в набегающем потоке отсутствуют. Потоки имеют одинаковую скорость u_0 , давление p_H и температуру T_H ,

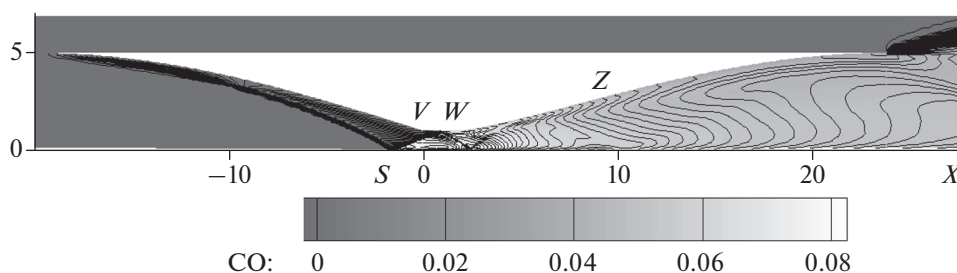


Рис. 1. Изолинии числа Маха на фоне массовой доли окиси углерода в стационарном потоке с детонационным горением стехиометрической смеси паров керосина с атмосферным воздухом на высоте 40 км при полетном числе Маха $M_0 = 9$.

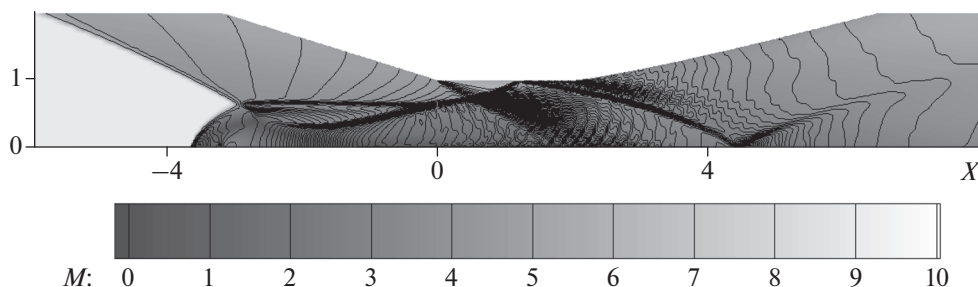


Рис. 2. Изобары на фоне числа Маха в процессе запуска базового сопла при $N = 50$.

характерные для полета на высоте H с числом Маха M_0 .

Второй подход предполагает решение задачи в два этапа. Вначале решается задача запуска сопла в сверхзвуковом потоке модельного газа с постоянным показателем адиабаты $k = 1.4$, характерным для воздуха [13, 14]. Сопло при этом разгоняется до заданного значения числа Маха M_0 . Успешным считается запуск, при котором в диффузоре формируется стационарное сверхзвуковое течение. На втором этапе в сопло вместо модельного газа начинает поступать смесь паров керосина с воздухом. С этого момента скорость, давление, температура и состав газа на входе в расчетную область остаются постоянными, как и в первом подходе. В качестве начальных данных как во внутреннем, так и во внешнем течении используется решение задачи о запуске.

Расчетная область разбита на три части: область сопла, область внешнего течения и область течения за срезом канала (см. рис. 1). Используется неподвижная расчетная сетка. Каждое сечение по оси ординат разбито на N ячеек. В центральной цилиндрической части сопла расчетные ячейки имеют квадратную форму, а в диффузоре и расширяющейся секции шаг по оси абсцисс увеличивается пропорционально ординате соплового контура.

В основе математической модели лежат двумерные нестационарные уравнения Эйлера для осесимметричных течений многокомпонентного реагирующего газа. На твердых границах и оси симметрии выполняются условия непроницаемости. На свободных границах производные параметров потока полагаются равными нулю. Расчеты проводятся с использованием технологии распараллеливания OpenMP на основе модифицированной схемы С.К. Годунова, обеспечивающей второй порядок аппроксимации гладких решений по пространственным переменным [15, 16].

Для расчета течения воспламенения и горения керосина используется доработанная по сравнению с представленной в работах [6–8] упрощенная кинетическая модель, которая базируется на

использовании *n*-декана в качестве однокомпонентного суррогата керосина [17]. Модель включает окисление *n*-декана как в высокотемпературной области ($T \geq 1100$ К) [18, 19], так и при более низких температурах [20] и содержит 42 компонента, которые участвуют в 75 химических реакциях. Для расчета тепловых эффектов, а также для вычисления констант скоростей обратных химических реакций используются термодинамические полиномы NASA [21, 22]. Тестирование кинетической модели проведено на основе сравнения расчетных зависимостей времени задержки воспламенения горючей смеси от температуры и давления с экспериментальными данными, полученными в ударных трубах [23, 24].

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Расчеты выполняются для условий атмосферного воздуха и высоты порядка 40 км. Температура воздуха $T_H \approx 250.4$ К, давление $p_H \approx 0.28323 \cdot 10^{-2} p_a$, где $p_a = 1$ атм = 101330 Па – нормальное атмосферное давление на уровне земли. В результате многочисленных расчетов на грубой сетке с $N = 25$ и однородным начальным распределением найдено сопло со следующими параметрами: радиус входа $R_1 = 5$ и длина диффузора $L = 20$ (рис. 1), которое при полетном числе Маха $M_0 = 9$ и $r_0 = 10$ см обеспечивает силу тяги $F \approx 360$ кГ в случае детонационного горения стехиометрической смеси паров керосина и воздуха. В пересчете на аэродинамическое сопротивление при нормальном давлении p_a это значение эквивалентно тяге в 127 т. Расход топлива составляет примерно 0.6 кг/с, энергетический коэффициент полезного действия (КПД) $\chi \approx 37\%$, полетный КПД η – немногим более 41%. Энергетический КПД – это разность потоков кинетической энергии газа на выходе из сопла (индекс “2”) и на входе в него, отнесенная к затраченной мощности W [12]:

$$\chi = \left(\int \frac{\rho_2 u_2^3}{2} 2\pi y dy - G \frac{u_0^2}{2} \right) / W.$$

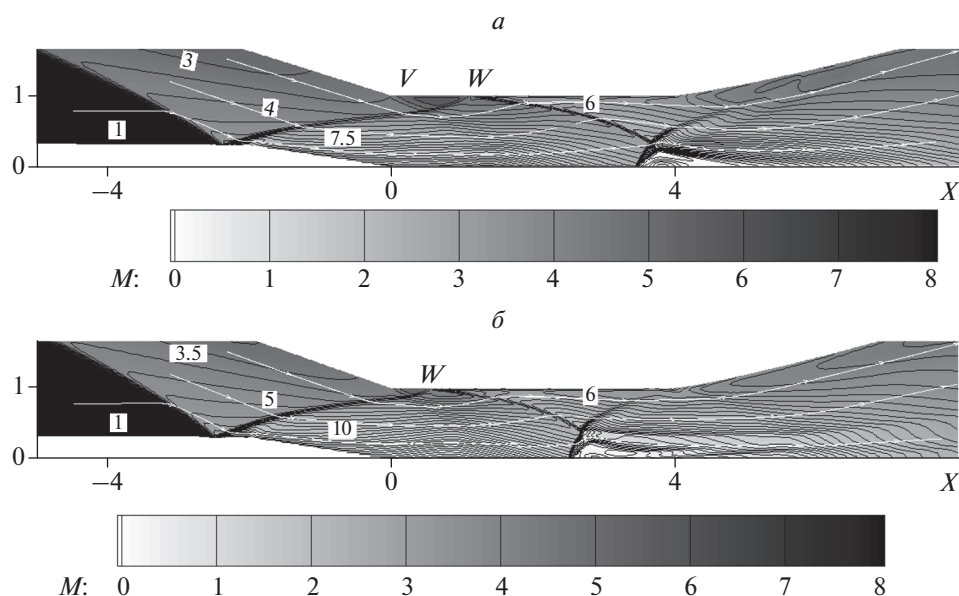


Рис. 3. Линии тока и изотермы (T/T_H) на фоне числа Маха установившегося воздушного потока в центральной части сопла с длиной диффузора $L = 20$, радиусом центрального тела $r_b = 0.3$ и радиусом входа $R_1 = 5.0$ (а) и 5.5 (б).

Здесь затраченная мощность $W = QG = Q_f G_f$, G и G_f – расход смеси и топлива, Q и Q_f – удельная теплота горения смеси и топлива соответственно. Для паров керосина $Q_f = 43$ МДж/кг. Полетный КПД – отношение полезной мощности к затраченной [12]: $\eta = W_u/W = Fu_0/W$.

Запуск сопла

Однако расчет на сетке с $N = 50$ показывает, что сопло с найденными параметрами не запуска-

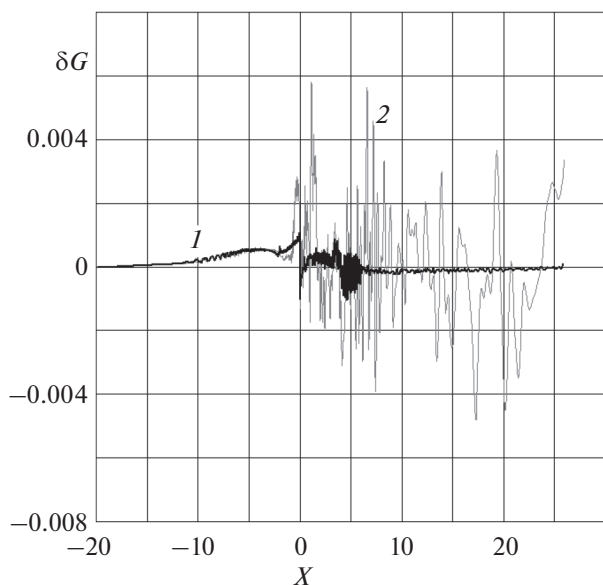


Рис. 4. Погрешность по расходу газа вдоль оси абсцисс при решении задачи запуска (кривая 1) и детонационного горения в случае базового сопла (кривая 2).

ется. Причиной неудачного запуска является нерегулярное взаимодействие косога сжатия уплотнения, возникающего в процессе разгона, с осью симметрии (рис. 2). За диском Маха в окрестности оси симметрии формируется дозвуковая область. Из-за сужения канала давление в этой области растет, область расширяется и перемещается вверх по потоку. В конечном счете дозвуковое течение заполняет весь диффузор.

Устранить условия обязательного формирования нерегулярного взаимодействия наклонной ударной волны с осью симметрии [25, 26] и провести успешный запуск позволяет коаксиальное центральное тело “конус–цилиндр–конус”, радиус цилиндрической части которого $r_b = 0.3$, длина $L_b = 6$, длина головного конуса $L_1 = 8$, длина хвостового конуса $L_2 = 2$ (рис. 3). Абсцисса конечной точки центрального тела совпадает с абсциссой угловой точки контура, так что наличие тела не изменяет расход газа и топлива.

Описанное сопло принимается в качестве базового. Далее варьируется длина диффузора L , радиусы входа и цилиндрической части центрального тела – R_1 и r_b соответственно. При изменении радиуса r_b сохраняется угол раскрытия наветренного конуса, длина цилиндрической части тела и второго конуса. Задача запуска решается на сетке с $N = 50$. Погрешность расчетов по расходу газа в установившемся потоке не превышает 0.1% (рис. 4, кривая 1). Результаты численного решения задачи запуска представлены в табл. 2 (колонка “Пуск”). Запуск проверяется на сетке с $N = 100$.

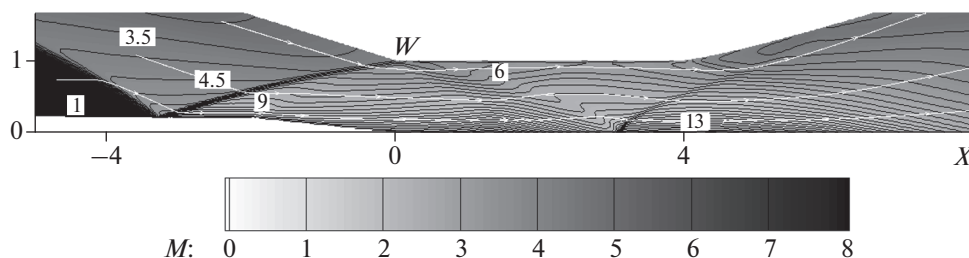


Рис. 5. Линии тока и изотермы (T/T_H) на фоне числа Маха установившегося воздушного потока в центральной части сопла с длиной диффузора $L = 25$, радиусом центрального тела $r_b = 0.2$ и радиусом входа $R_1 = 6$.

Расчеты показывают, что при неизменной длине диффузора L и постоянном радиусе центрального тела r_b успешный запуск сопла более вероятен при уменьшении радиуса входа R_1 . Увеличение последнего меняет конфигурацию и повышает интенсивность падающих и отраженных от оси симметрии ударных волн (рис. 3). Увеличение длины диффузора L , как и радиуса центрального тела r_b , позволяет увеличить радиус входа R_1 , сохраняя возможность запуска.

Имея в виду использование рассматриваемых сопел в задаче инициирования детонационного горения, следует отметить, что приход отраженной ударной волны SW (рис. 1) на стенку диффузора может привести к преждевременному вос-

пламенению смеси, что будет препятствовать получению тяги. Если точка W располагается в конце камеры сгорания или в расширяющейся секции сопла, разрежение за угловой точкой V контура снижает вероятность воспламенения в пристеночной области. Таким образом, для эффективного горения точка W должна располагаться на стенке цилиндрической части сопла недалеко от угловой точки V контура. С учетом повышения числа Маха в потоке воздушно-керосиновой смеси наиболее предпочтительным является совпадение точки W с угловой точкой V . В соплах с $L = 20$ наименьшее расстояние между точками V и W возникает при $R_1 = 5.5$ и $r_b = 0.3$ (№ 8 в табл. 2), и оно не превышает 0.5 (рис. 3б). В сопле с длиной диффузо-

Таблица 2. Результаты численного решения задачи запуска

| № варианта | L , дм | R_1 , дм | r_b , дм | Пуск | F , кГ | F_N , кГ | G_f , кг/с | G , кг/с | χ , % | η , % |
|------------|----------|------------|------------|------|----------|------------|--------------|------------|------------|------------|
| 1 | 20 | 5 | 0.1 | — | | | | | | |
| 2 | 20 | 4.5 | 0.1 | + | 309.3 | 307.6 | 0.476 | 7.62 | 29.8 | 41.6 |
| 3* | 20 | 4 | 0.1 | + | | | | | | |
| 4 | 20 | 5.5 | 0.2 | — | | | | | | |
| 5 | 20 | 5 | 0.2 | + | 398.0 | 388.5 | 0.588 | 9.40 | 31.2 | 43.4 |
| 6* | 20 | 4.5 | 0.2 | + | 138.7 | 133.5 | 0.476 | 7.62 | 37.5 | 18.6 |
| 7 | 20 | 6 | 0.3 | — | | | | | | |
| 8 | 20 | 5.5 | 0.3 | + | 470.1 | 442.4 | 0.711 | 11.38 | 39.3 | 44.6 |
| 9 | 20 | 5 | 0.3 | + | 386.9 | 371.2 | 0.588 | 9.40 | 39.5 | 44.4 |
| 10 | 25 | 6.0 | 0.1 | — | | | | | | |
| 11 | 25 | 5.5 | 0.1 | + | 518.5 | 514.5 | 0.711 | 11.38 | 36.4 | 46.7 |
| 12* | 25 | 5 | 0.1 | + | 86.9 | 84.7 | 0.588 | 9.40 | 12.6 | 9.97 |
| 13 | 25 | 6.5 | 0.2 | — | | | | | | |
| 14 | 25 | 6.0 | 0.2 | + | 509.8 | 494.3 | 0.846 | 13.54 | 34.3 | 40.6 |
| 15 | 25 | 5.5 | 0.2 | + | 511.7 | 500.9 | 0.711 | 11.38 | 36.9 | 46.1 |
| 16* | 25 | 5.0 | 0.2 | + | 61.4 | 55.34 | 0.588 | 9.40 | 2.55 | 6.7 |
| 17 | 25 | 6.5 | 0.3 | — | | | | | | |
| 18 | 25 | 6.0 | 0.3 | + | 517.4 | 485.4 | 0.846 | 13.54 | 35.9 | 41.2 |
| 19* | 25 | 5.5 | 0.3 | + | 419.6 | 404.0 | 0.711 | 11.38 | 38.6 | 39.8 |
| 20* | 25 | 5 | 0.3 | + | 58.98 | 49.0 | 0.588 | 9.40 | 10.6 | 6.76 |

* Варианты, в которых сгорает лишь некоторая часть смеси, подобно картинке на рис. 6б.

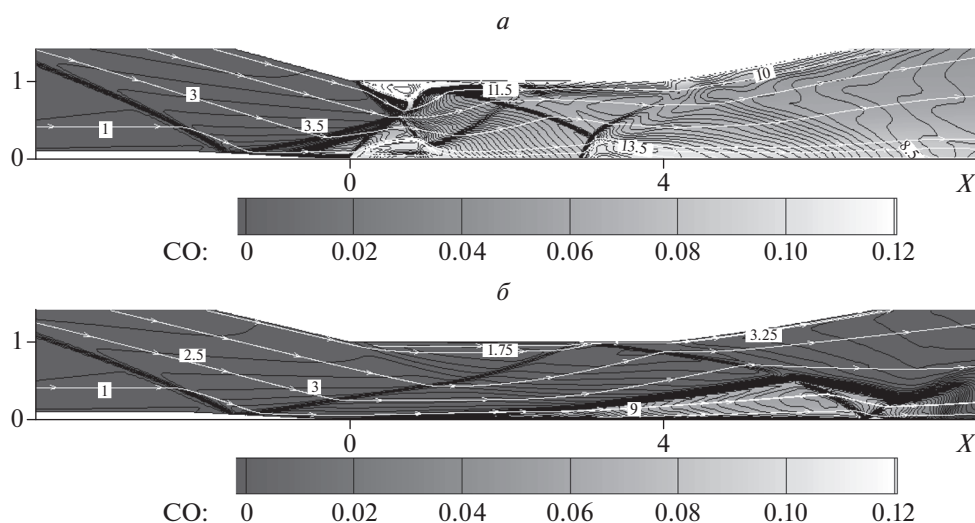


Рис. 6. Линии тока и изотермы (T/T_0) на фоне массовой концентрации окиси углерода при сжигании стехиометрической воздушно-керосиновой смеси в сопле с $L = 20$, $r_b = 0.1$, $R_1 = 4.5$ (а) и 4 (б).

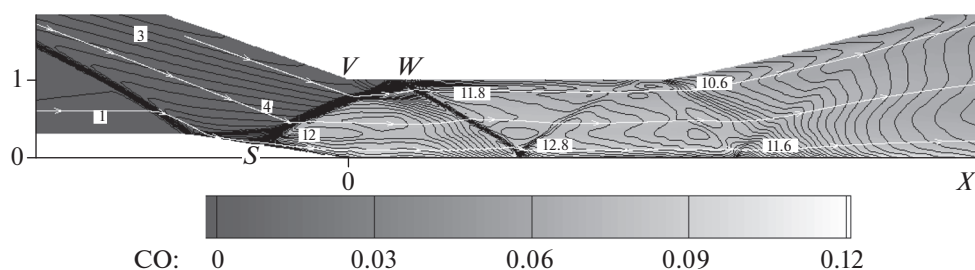


Рис. 7. Линии тока и изотермы (T/T_H) на фоне массовой концентрации окиси углерода при сжигании стехиометрической воздушно-керосиновой смеси в сопле с $L = 20$, $R_1 = 5.5$, $r_b = 0.3$.

ра $L = 25$, радиусом центрального тела $r_b = 0.2$ и радиусом входа $R_1 = 6$ (№ 14 в табл. 1) точка W практически совпадает с угловой точкой V контура (рис. 5).

Детонационное горение паров керосина на высоте 40 км

В табл. 2 представлены значения силы тяги с учетом (F) и без учета (F_N) сил, действующих на центральное тело, расход топлива (G_f) и смеси в целом (G), а также энергетический (χ) и полетный (η) КПД детонационного горения паров керосина при различных значениях варьируемых параметров сопла и центрального тела: L , R_1 и r_b . Следует отметить, что центральное тело вносит положительный вклад в тягу ($F > F_N$) из-за повышенного давления на стенке заднего конуса (см., например, рис. 5). Результаты получены на основе расчетов, в которых решение задачи запуска используется для задания начальных данных в задаче о детонационном горении воздушно-керосиновой смеси.

В соплах с длиной диффузора $L = 20$ центральное тело с радиусом $r_b = 0.1$ (№ 1–3 в табл. 2) обеспечивает стабильное детонационное горение и тягу только при радиусе входа $R_1 = 4.5$ (рис. 6а). При $R_1 = 4$ интенсивности падающего и отраженного скачка уплотнения хватает лишь для воспламенения небольшой части газа в окрестности оси симметрии (рис. 6б). Горение не приводит к появлению тяги. Увеличить R_1 до 5 нельзя из-за невозможности запуска сопла. Наилучшие показатели в соплах с длиной диффузора $L = 20$ получены при $R_1 = 5.5$ и $r_b = 0.3$ (№ 8), т.е. в случае наиболее близкого расположения точек V и W в задаче запуска (рис. 7). При $L = 25$ наиболее высокие силовые показатели и значения КПД получены в сопле с $R_1 = 5.5$ и $r_b = 0.1$ (№ 11 в табл. 2), в котором ударный фронт детонационной волны практически точно попадает в угловую точку V на контуре сопла (рис. 8). Немного ниже оказываются показатели в соплах с $r_b = 0.2$ при $R_1 = 6$ и 5.5 (№ 14 и 15). Если $r_b = 0.3$, то полное сгорание газа в детонационной волне происходит только при $R_1 = 6$

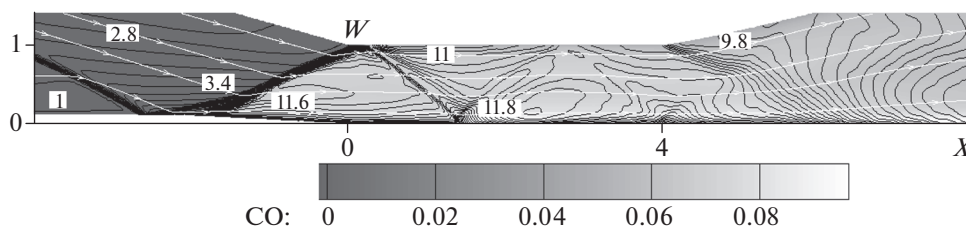


Рис. 8. Линии тока и изотермы (T/T_H) на фоне массовой концентрации окиси углерода при сжигании стехиометрической воздушно-керосиновой смеси в сопле с $L = 25$, $R_1 = 5.5$, $r_b = 0.1$.

(№ 18). Другие два случая: с $R_1 = 5.5$ и 5 (№ 19, 20), отличаются тем, что в горении участвует только часть газа, которой определяет полученные значения тяги и КПД.

Таким образом, эффективному детонационному горению стехиометрической воздушно-керосиновой смеси на высоте порядка 40 км соответствуют такие сопла, которые обеспечивают попадание инициирующего ударного фронта на стенку цилиндрической камеры сгорания в непосредственной близости от угловой точки ее сопряжения с диффузором.

ВЫВОДЫ

1. Численно показана возможность невынужденного инициирования детонационного горения паров керосина с воздухом за наклонным ударным фронтом в условиях высотной атмосферы при натекании гиперзвукового потока в осесимметричное сопло Лавала с центральной цилиндрической частью.

2. Определены параметры сопел, в которых детонационное горение паров керосина с атмосферным воздухом на высоте 40 км происходит с КПД более 40%, обеспечивая высокие силовые характеристики при числе Маха набегающего потока $M_1 = 9$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 20-51-00003 (Бел_а)), а также в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации “Экспериментальное и теоретическое исследование кинетических процессов в газах” (регистрационный номер АААА-А19-119012990112-4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зельдович Я.Б. // ЖТФ. 1940. Т. 10. № 17. С. 1453.
2. Tunik Yu.V., Mayorov V.O. // Acta Astronaut. 2022. V. 194. P. 488. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2021.09.038>
3. Wang G., Liu W., Liu S., Zhang H., Peng H., Zhou Y. // Ibid. 2021. V. 189. P. 722.
4. Фролов С.М., Аксенов В.С., Иванов В.С. // Хим. физика. 2011. Т. 30. № 8. С. 58.
5. Smirnov N.N., Nikitin V.F., Stamov L.I., Mikhailchenko E.V., Tyurenkova V.V. // Acta Astronaut. 2019. V. 163. P. 168.
6. Туник Ю.В., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 9. С. 8.
7. Туник Ю.В., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю., Славинская Н.А. // Физика горения и взрыва. 2020. Т. 56. № 3. С. 1.
8. Туник Ю.В., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю., Ассад М.С. // Теплофизика высоких температур. 2021. Т. 59. № 4. С. 541.
9. Shi X., Xie H., Zhou L., Zhang Y. // Acta Astronaut. 2022. V. 190. P. 342.
10. Xiang G., Li H., Zhang G., Xie X., Zhang Y. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2021. V. 46. P. 17435.
11. Qin Q., Zhang X. // Ibid. 2019. V. 44. P. 17004.
12. Черный Г.Г. Газовая динамика. М.: Наука, 1988.
13. Зубин М.А., Туник Ю.В. // Изв. РАН. МЖГ. 2014. № 4. С. 155.
14. Зубин М.А., Туник Ю.В. // Физ.-хим. кинетика в газ. динамике. 2015. Т. 16. № 3. С. 1.
15. Туник Ю.В. // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2018. Т. 58. № 10. С. 1629.
16. Туник Ю.В. // Физ.-хим. кинетика в газ. динамике. 2018. Т. 19. № 1. С. 1.
17. Козлов В.Е., Титова Н.С., Торохов С.А. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 5. С. 3.
18. Slavinskaya N.A. AIAA Paper 2008-992.
19. Yan Y., Liu Y., Di D., Dai C., Li J. // Energy Fuels. 2016. V. 30. № 12. P. 10847.
20. Tay K.L., Yang W., Mohan B. et al. // Energy Convers. Manage. 2016. V. 108. P. 446.
21. Burcat A., Ruscic B. Third millennium ideal gas and condensed phase thermochemical database. Tech. Rep. № ANL-05/20, TAE 960. Lemont, IL, USA: Argonne National Laboratory, 2005.
22. Chang Y., Jia M., Liu Y., Li Y., Xie M. // Combust. and Flame. 2013. V. 160. P. 1315.
23. Dean A.J., Penyažkov O.G., Sevruck K.L., Varatharajan B. // Proc. Combust. Inst. 2007. V. 31. P. 2481.
24. Wang H., Oehlschlaeger M.A. // Fuel. 2012. V. 98. P. 249.
25. Исакова Н.П., Крайко А.Н., Пьянков К.С., Туллеева Н.И. // ПММ. 2012. Т. 76. № 4. С. 623.
26. Туник Ю.В. // Изв. РАН. МЖГ. 2014. № 5. С. 142.

**ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ**

УДК 533.6.07

**ОСЛАБЛЕНИЕ СФЕРИЧЕСКОЙ УДАРНОЙ ВОЛНЫ
ПЕРФОРИРОВАННОЙ ПЕРЕГОРОДКОЙ В КОНИЧЕСКОЙ
УДАРНОЙ ТРУБЕ**

© 2022 г. С. В. Хомик^{1*}, А. Н. Иванцов¹, С. П. Медведев¹, Э. К. Андержанов¹, И. В. Гук²,
А. И. Михайлин^{1,2}, М. В. Сильников^{1,2}, С. Н. Васильева², А. М. Тереза¹

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук,
Москва, Россия

²АО “НПО Спецматериалов”, Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: sergei.khomik@gmail.com

Поступила в редакцию 23.09.2021;

после доработки 25.10.2021;

принята в печать 22.11.2021

Экспериментально определены избыточное давление и импульс фазы сжатия за перфорированными перегородками, расположенными поперек конической ударной трубы при распространении в ней сферической ударной волны. В экспериментах использованы перегородки с различной проницаемостью. Варьировалась интенсивность падающей на перегородку ударной волны. Полученная степень ослабления избыточного давления и импульса фазы сжатия ударной волны растет с уменьшением проницаемости перегородки и увеличением интенсивности волны, оставаясь практически постоянной по длине конической ударной трубы.

Ключевые слова: ударная труба, коническая ударная труба, сферическая ударная волна, перфорированная перегородка.

DOI: 10.31857/S0207401X22080040

ВВЕДЕНИЕ

В работах [1–3] сделан вывод о том, что коническая ударная труба (КУТ) является эффективным средством для воспроизведения динамических нагрузок при сферическом взрыве. Это позволяет использовать КУТ для исследования ослабления сферических ударных волн (УВ) при их взаимодействии с различными взрывозащитными покрытиями и экранами. Как правило, покрытия представляют собой пористую среду, сформированную насыпными дисперсными материалами (песок, гранулы искусственного происхождения), различные виды пены (водно-механические или с полимерным каркасом) и материалы на основе тканей (в том числе используемые для защиты от пуль и осколков) [2, 3]. Экраны, иногда называемые завесами, состоят из взвеси капель, порошков, газонаполненных шариков, нанесенной на каркас пены, а также пластин с отверстиями (перфорированные перегородки (ПП)), слоев сетки и различных проницаемых каркасов. Преимущество экранов из ПП заключается в том, что такой экран может многократно использоваться без ущерба для его работоспособности. Основной характеристикой ПП является проницаемость перегородки (ν) – отноше-

ние суммы площадей всех отверстий перегородки к площади канала, перекрываемого перегородкой.

Прохождение ударных волн с постоянными параметрами за фронтом через ПП достаточно подробно исследовано в работах [4–11]. Уменьшение интенсивности УВ при прохождении через перегородку удобно характеризовать такими безразмерными параметрами, как δ_m – коэффициент ослабления амплитуды взрывной нагрузки, равный

$$\delta_m = \Delta p_{\text{с ПП}} / \Delta p_{\text{без ПП}},$$

и η – коэффициент изменения импульса фазы сжатия, равный

$$\eta = I_{\text{с ПП}} / I_{\text{без ПП}},$$

где Δp – избыточное давление на фронте УВ, а I – импульс фазы сжатия УВ. Определение коэффициента η важно для сферических взрывов, при которых формируются ударные волны конечной длительности со спадающим давлением за фронтом. Поражающее действие таких волн зависит не только от избыточного давления на фронте Δp , но и от импульса фазы сжатия I :

$$I = \int_0^{\tau} \Delta p(t) dt,$$

где τ – время действия фазы сжатия, $\Delta p(t)$ – изменение избыточного давления за фронтом волны со временем. Следует отметить, что результаты работ [4–11] не позволяют, вследствие постоянства параметров за фронтом УВ, сделать выводы о действии сферического взрыва.

Имеются отдельные данные по ослаблению УВ цилиндрической и сферической симметрии с помощью ПП. Так, в экспериментах по ослаблению УВ [12], образующейся при разрушении цилиндрической оболочки, наполненной газом при повышенном давлении, показано, что длительность фазы сжатия УВ при прохождении через ПП не изменяется. В работах [13, 14] исследовалось ослабление решетками и ПП взрывных волн, образующихся при детонации зарядов конденсированных ВВ. В работе [13] приведены данные по значениям импульса волны за преградой. В этих экспериментах преграды конечных размеров размещались в открытом пространстве и поэтому могли иметь место двухмерные эффекты при их обтекании. Вследствие этого сравнение данных из [13] с результатами, полученными в одномерной постановке в трубах, не может считаться правомерным.

В работе [15] найдены закономерности взаимодействия плоских (образующихся в ударной трубе) УВ конечной длительности с ПП различной проницаемости, установленными в одном из сечений трубы. Регистрировались параметры падающей на перегородку и прошедшей ударной волны. Показано, что для значений проницаемости в диапазоне $0.009 < v < 0.3$ справедливо эмпирическое соотношение $\delta_m = 1.14v^{0.62}$.

В работе [16] представлен пример разработки применимого на практике способа использования перфорированного экрана конечных размеров для ослабления нагрузки на здание при внешнем взрыве объема газовой горючей смеси. В проведенных опытах взрывная волна генерировалась дефлаграционным сгоранием облака стехиометрической смеси пропан–кислород. Разбавление смеси азотом позволяло варьировать скорость горения при взрыве и, соответственно, интенсивность волны. Генерируемые волны имели как крутой фронт – ударные волны, так и пологий – волны сжатия. Показано, что наиболее эффективно преграда снижает нагрузку в областях, расположенных близко к взрывающемуся объему.

Цель работы – анализ данных по ослаблению сферической ударной волны перфорированной перегородкой, полученных в экспериментах в конической ударной трубе. В опытах варьировались интенсивность падающей УВ и проницаемость ПП. Измерения проведены на различном расстоянии от ПП.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Эксперименты проводили в горизонтально расположенной конической ударной трубе – КУТ-14, состоящей из камеры высокого давления (КВД) и открытой конической камеры низкого давления с углом раствора 14° и длиной до 3 м. Камеры разделялись разрывными мембранами из алюминиевой или медной фольги с различным давлением разрыва. Камера высокого давления представляет собой цилиндр длиной 100 мм и диаметром 54 мм. Общий вид и описание КУТ-14, оснащенной расположенными до и после перегородки датчиками давления, приведены в работах [2, 3]. Перфорированная перегородка в виде стальной пластины с отверстиями располагалась на расстоянии 764 мм от мембраны. Диаметр равномерно расположенных отверстий составлял 10 мм, а толщина пластины – 8 мм. Проницаемость перегородки менялась в диапазоне $0.21 < v < 0.41$. В качестве толкающего газа в КВД использовалась смесь гелия с воздухом при различном начальном давлении, определяемом давлением разрыва мембраны. Использование мембран различной толщины и материала позволяло варьировать интенсивность УВ. При отсутствии перегородки на расстоянии 380 мм вниз по течению от сечения ее установки получены величины избыточного давления УВ Δp_0 в диапазоне от 0.15 до 0.74 бар со следующими промежуточными значениями: 0.21 и 0.48 бар. Во всех опытах коническая камера низкого давления была заполнена воздухом при нормальных условиях.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

При проведении экспериментов проводили сравнение амплитуды и профиля давления сферических УВ, регистрируемых на стенке трубы в отсутствие ПП и при ее наличии. Пример такого сравнения приведен на рис. 1, где представлены записи давления датчиком, расположенным на расстоянии 380 мм вниз по течению от ПП для перегородок с различной проницаемостью, в том числе для $v = 0$. Избыточное давление на фронте сферической УВ в отсутствие ПП составляло $\Delta p_0 = 0.74$ бар. Как видно, по мере увеличения перекрытия сечения избыточное давление на стенке уменьшается, и при 80%-ном перекрытии ($v = 0.21$) давление на фронте уменьшается почти в 2 раза: с $\Delta p_0 = 0.74$ бар до $\Delta p = 0.39$ бар. Одновременно с этим происходит увеличение задержки между моментом прихода ударной волны на датчик при отсутствии перегородки и на этот же датчик при ее наличии.

При анализе полученных экспериментальных зависимостей определялись коэффициенты δ_m и η . Оба импульса, входящие в выражение для η , на-

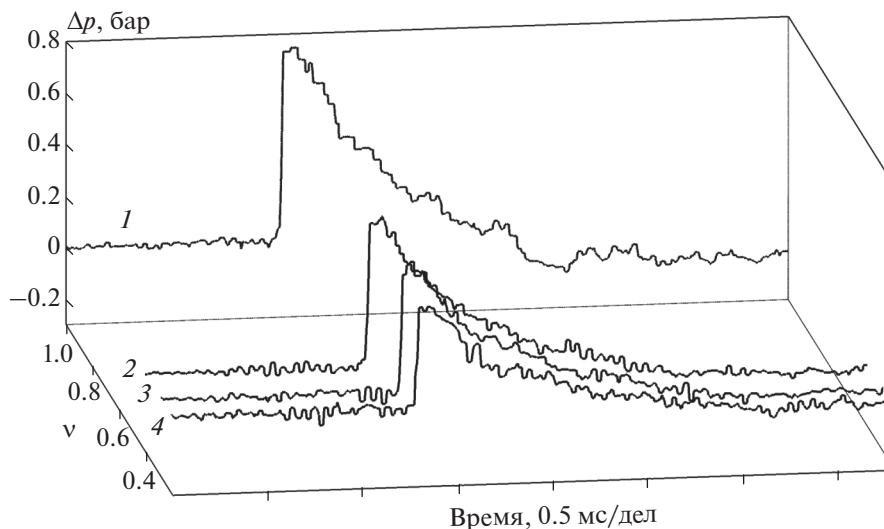


Рис. 1. Профили давления на стенке конической ударной трубы при различной проницаемости ν перфорированной перегородки на расстоянии от нее 380 мм при интенсивности падающей волны $\Delta p_0 = 0.74$ бар: 1 – без перегородки, 2 – $\nu = 0.41$, 3 – $\nu = 0.29$, 4 – $\nu = 0.21$.

ходили путем расчета площади под графиком профиля давления соответствующего датчика. На рис. 2 показана зависимость параметра δ_m от расстояния до перегородки при различной интенсивности падающей сферической УВ. Проницаемость ν при этом сохраняется постоянной и равной $\nu = 0.41$. Данные, представленные на рис. 2, показывают, что коэффициент δ_m практически не изменяется при расстоянии от перегородки более 380 мм независимо от интенсивности УВ. На расстоянии от ПП, меньшем 200 мм, при слабых УВ, соответствующих избыточному давлению в УВ, равному $\Delta p_0 = 0.15$ и 0.21 бар, наблюдаются несколько меньшие значения δ_m . Это может быть связано с тем, что поскольку каждое отверстие перегородки является источником сферической УВ, то формирование результирующей сферической УВ за перегородкой происходит не мгновенно, а за счет серии столкновений множества отдельных сферических волн. Потери, неизбежные при этом, будут приводить к меньшему среднему давлению, чем в сформировавшейся сферической УВ с треугольным профилем давления за фронтом на большем расстоянии от ПП. Это может быть вызвано и тем, что датчик регистрирует усредненный по его диаметру (равному 10 мм) сигнал, являющийся суперпозицией проходящих и поперечных волн.

Более подробно формирование сферической УВ из отдельных сферических волн за ПП рассмотрено и численно смоделировано в работе [17]. В пользу предложенного объяснения свидетельствуют и данные, приведенные на рис. 3, где показано изменение коэффициента η в зависимости от расстояния до перегородки при различной

интенсивности УВ и фиксированном значении проницаемости $\nu = 0.41$. На ближайшем к перегородке датчике регистрируется такое же значение η , как и далее. Таким образом, как и в случае с δ_m , расстояние до ПП несущественно влияет на безразмерный параметр, характеризующий импульс фазы сжатия сферической УВ после перегородки. Отметим, что зарегистрированное на расстоянии 891 мм от ПП меньшее значение η может быть

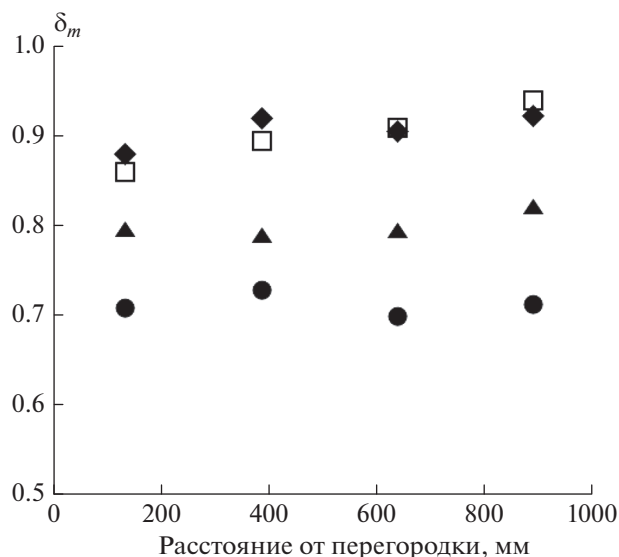


Рис. 2. Зависимость коэффициента ослабления амплитуды взрывной нагрузки, δ_m , от расстояния до ПП с $\nu = 0.41$ при различных величинах Δp_0 : \square – 0.15 бар, \blacklozenge – 0.21 бар, \blacktriangle – 0.48 бар, \bullet – 0.74 бар.

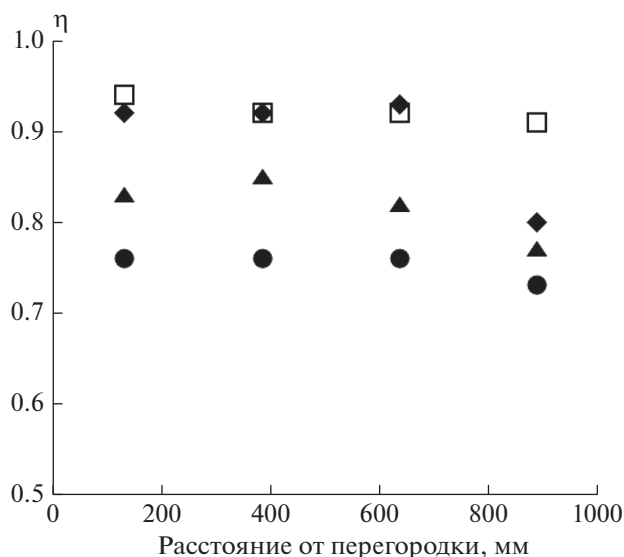


Рис. 3. Зависимость коэффициента изменения импульса фазы сжатия, η , от расстояния до ПП с $v = 0.41$ при различных величинах Δp_0 : \square – 0.15 бар, \blacklozenge – 0.21 бар, \blacktriangle – 0.48 бар, \bullet – 0.74 бар.

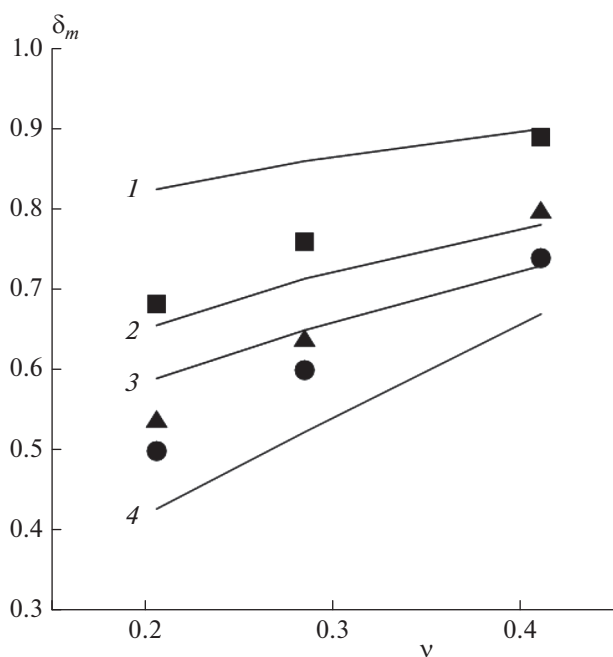


Рис. 4. Зависимость коэффициента ослабления амплитуды взрывной нагрузки, δ_m , от проницаемости ПП. Точки – эксперименты при различных величинах Δp_0 на расстоянии 380 мм от ПП: \blacksquare – 0.15 бар, \blacktriangle – 0.48 бар, \bullet – 0.74 бар. Кривые 1, 2 и 3 для экспериментов при соответствующих значениях Δp_0 рассчитаны по соотношениям из работы [18]. Прямая 4 соответствует корреляции δ_m и v [15].

обусловлено влиянием волны разрежения, распространяющейся от открытого торца КУТ.

На рис. 4 представлены зависимости коэффициента ослабления амплитуды взрывной нагруз-

ки (δ_m) от проницаемости ПП (v). Видно, что увеличение параметра v приводит к уменьшению δ_m . Важно отметить, что увеличение интенсивности взаимодействующей с перегородкой УВ приводит к более сильному ослаблению. Этот вывод совпадает с результатами натуральных экспериментов [16] по взрывам топливовоздушных облаков. Как уже ранее указывалось, в работе [16] показано, что наиболее эффективно преграда снижает нагрузку в областях, расположенных близко к взрывающемуся объему, т.е. там, где сферическая УВ сильнее. Данный факт имеет большое практическое значение и должен учитываться при оценке взрывобезопасности различных объектов.

Корреляция между коэффициентом δ_m и v , представленная в работе [15], показана на рис. 4 в виде прямой 4. Эта прямая располагается ниже, чем значения коэффициента δ_m , даже при максимальной использованной в опытах интенсивности УВ. Отличие эксперимента от расчета по корреляционной формуле из работы [15] не превышает 10% и постоянно во всем диапазоне использованных проницаемостей. Однако это относится только к сравнительно сильным УВ (в нашем случае $\Delta p_0 = 0.74$ бар). При уменьшении интенсивности УВ разница становится больше. Одной из причин отмеченной разницы может быть то, что в работе [15] исследовались более интенсивные плоские УВ, в отличие от сферических УВ, рассматриваемых в настоящей работе.

В работе [18] предложены полуэмпирические соотношения для расчета изменения интенсивности УВ после взаимодействия с ПП, основанные на модели, описывающей ослабление УВ в шероховатых каналах [19] и слоях гранулированных материалов [20]. Результаты расчета коэффициента δ_m по соотношениям из [18] для условий проведенных экспериментов представлены на рис. 4 кривыми 1, 2 и 3 для интенсивностей волны 0.15, 0.48 и 0.74 бар соответственно. Отметим, что расчеты по модели из работы [18] отражают наблюдаемую в экспериментах зависимость степени ослабления УВ от ее интенсивности – чем выше интенсивность, тем больше ослабление. Кроме того, видно, что наилучшее соответствие с экспериментом получается для больших значений проницаемости ПП. При $v \approx 0.2$ разница может достигать 10–15%.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С использованием конической ударной трубы разработана и обоснована методика исследования закономерностей ослабления ударно-волновой нагрузки при взаимодействии сферической ударной волны с перфорированной перегородкой. Эксперименты показали, что давление и импульс, передаваемые через ПП, зависят от интен-

сивности сферической УВ и проницаемости перегородки.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-19-00554.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Медведев С.П., Иванцов А.Н., Михайлин А.И. и др.* // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 8. С. 3.
2. *Медведев С.П., Андержанов Э.К., Гук И.В. и др.* // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 12. С. 24.
3. *Хомик С.В., Гук И.В., Иванцов А.Н. и др.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 8. С. 63.
4. *Bowman J.E., Nibblat G.V.F.* // Proc. Soc. Sec. B. 1955. V. 68. Pt. 12. № 432. P. 1008.
5. *Бондаренко А.В., Ибрагим М.А.* // Изв. АН СССР. МЖГ. 1967. № 3. С.115.
6. *Dain C.G., Hodson J.P.* // Aeronaut Quart. 1974. V. 25. № 2. P. 101.
7. *Косточко Ю.П.* // Тр. НИИ прикл. математики и механики при Томском ун-те. 1974. Т. 5. С. 106.
8. *Mori Y., Hijikata K., Shimizu T.* // Proc. 10th Intern. Shock Tube Sympos. Kyoto: Kyoto Univ., 1975. P. 400.
9. *Tong K.O., Knihgt C.J., Srivastava B.N.* // AIAA J. 1980. V. 18. P. 1298.
10. *Шевцов Б.Л.* // Взаимодействие ударных волн с проницаемыми преградами. М.: 1982. 20 с. Деп. в ВИНТИ 16.03.82, № 1192-82.
11. *Гринь В.Т., Крайко А.Н., Миллер Л.Г.* // ЖПМТФ. 1981. № 3. С. 95.
12. *Иванов А.Н., Борисовская В.Л.* // Тр. ЦАГИ. 1977. Вып. 1834. С. 26.
13. *Baker W.E., Cox P.A., Westine P.S. et al.* Explosion hazards and evaluation. Amsterdam—N.Y.—Oxford: Elsevier, 1983.
14. *Mineev V.N., Klapovsky V.E., Matseevich B.F. et al.* // Proc. 5th Sympos. Explos Work. Metals. Gottwaldow: Dum. Techniky CSVTS Pardubice, 1982. P. 357.
15. *Гельфанд Б.Е., Медведев С.П., Поленов А.Н.* // Изв. АН СССР. МЖГ. 1987. № 6. С. 74.
16. *Горев В.А., Тюрин Н.В.* // Пожаровзрывобезопасность. 2005. № 2 С. 33.
17. *Медведев С.П., Хомик С.В., Гельфанд Б.Е.* // Хим. физика. 2009. Т. 28. № 12. С. 52.
18. *Гельфанд Б.Е., Фролов С.М.* // ЖПМТФ. 1990. № 4. С. 42.
19. *Гельфанд Б.Е., Фролов С.М., Медведев С.П.* // Физика горения и взрыва. 1990. Т. 26. № 3. С. 91.
20. *Медведев С.П., Фролов С.М., Гельфанд Б.Е.* // Инж.-физ. журн. 1990. Т. 58. № 6. С. 924.

ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ

УДК 661.961

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА РЕЖИМОВ ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ
КОНВЕРСИИ ПРОДУКТОВ ПИРОЛИЗА ДРЕВЕСИНЫ
С ПОЛУЧЕНИЕМ ВОДОРОДА И СИНТЕЗ-ГАЗА

© 2022 г. М. В. Цветков^{1, 2*}, В. М. Кислов¹, Ю. Ю. Цветкова¹, А. Ю. Зайченко¹,
Д. Н. Подлесный¹, И. В. Седов¹, Е. А. Салганский¹

¹Институт проблем химической физики Российской академии наук, Черноголовка, Россия

²Сахалинский государственный университет, Южно-Сахалинск, Россия

*E-mail: tsvetkov@icp.ac.ru

Поступила в редакцию 08.11.2021;

после доработки 16.12.2021;

принята в печать 20.12.2021

Проведена термодинамическая оценка режимов окислительной конверсии продуктов пиролиза древесины с получением водорода и синтез-газа. Исследованы режимы воздушной, кислородной и паровоздушной конверсии продуктов пиролиза древесины. В случае воздушной конверсии с увеличением коэффициента избытка топлива (ϕ) концентрация водорода логарифмически растет и достигает 29 об.% при $\phi = 10$ и $T = 1000$ К, однако уже при $\phi = 3$ в продуктах появляется конденсированный углерод. Увеличение температуры до 1300 К незначительно повышает выход водорода: до 33 об.% при $\phi = 10$, и при этой температуре сажеобразование начинается при $\phi = 5$. Добавление паров воды приводит к увеличению содержания водорода в продуктах, а сажеобразование в этом случае начинается при $\phi = 9$. Кислородная конверсия позволяет увеличить концентрации водорода и монооксида углерода в продуктах до 42.1 и 45.5 об.%, соответственно, вследствие отсутствия разбавления их азотом. Образование конденсированного углерода не является недостатком процесса, недостатком процесса, поскольку он (углерод) может рассматриваться как целевой продукт; при этом снижается количество выбросов диоксида углерода.

Ключевые слова: древесная смола, конверсия, синтез-газ, водород, термодинамика.

DOI: 10.31857/S0207401X22080143

ВВЕДЕНИЕ

Экономическое развитие современного общества невозможно без обеспечения соответствующего уровня (и объема) вырабатываемой энергии. Практикуемое использование ископаемых источников в качестве основы энергетики в настоящее время не полностью отвечает современным требованиям человечества к энергоэффективности и экологичности топливно-энергетического комплекса. Ограниченность ресурсов, снижение их качества и экологические проблемы, связанные с их добычей и переработкой, а также выбросы вредных веществ, образующихся при их сжигании, стимулируют поиск новых, экологически чистых источников энергии [1, 2].

Современной тенденцией в развитии технологической оснащенности общества является переход к низкоуглеродной энергетике и использованию углеродно-нейтральных видов топлив. Одно из таких топлив — газообразный водород, что обусловлено присущим ему рядом преимуществ,

главные из которых — экологическая чистота и высокий уровень энергии в единице массы [3–5].

В отличие от природного газа запасов молекулярного водорода в природе не существует, поэтому для его получения используют различное сырье и методы. В основу одной из классификаций способов получения водорода главным критерием положена его углеродная нейтральность: чем больше оксидов углерода выделяется при производстве водорода, тем менее экологичным будет считаться такой способ получения [6]. Степень углеродной нейтральности каждого способа получения водорода обозначается цветом [7].

Наиболее экологически чистым является процесс получения “зеленого” водорода, осуществляемый с помощью электролиза воды, с использованием энергии, получаемой из возобновляемых источников, таких как ветер, солнечная или гидроэнергия. При таком способе производства водорода выбросы CO_2 минимальны, однако он является самым дорогостоящим [8, 9], поэтому его масштабы в настоящее время невелики. Не-

сколько более дешевым, но менее экологичным является процесс получения “желтого” (“оранжевого”) водорода путем электролиза воды с использованием электроэнергии, полученной на атомных электростанциях. Выбросы CO_2 при осуществлении этого процесса также минимальны, но получение энергии на АЭС потенциально связано с другими типами экологических загрязнений [10–13].

На данный момент большая часть водорода производится из ископаемых источников энергии. Основная его часть (до 90%) относится к так называемому “серому” водороду, получаемому путем каталитической (в основном паровой и парокислородной) конверсии природного газа (метана), проводимой в две стадии, на первой из которых в качестве промежуточного продукта получается синтез-газ (он также используется в качестве полупродукта в некоторых нефтехимических производствах); вторая стадия заключается в проведении реакции дальнейшей паровой конверсии одного из компонентов синтез-газа — CO , что позволяет получить дополнительное количество водорода [14, 15]. Данный способ требует меньших внешних энергозатрат, чем производство “зеленого” водорода, однако в ходе химической реакции выделяется углекислый газ, причем в том же объеме, что и при сгорании природного газа (расходуется также энергия на конверсию), поэтому “серый” водород тоже не может считаться экологически чистым [16, 17]. Если при конверсии осуществляется улавливание и захоронение образующегося CO_2 (технологии Carbon Capture, Utilization and Storage), то удается достичь примерно двукратного сокращения вредных углеродных выбросов. Получаемый таким образом “голубой” водород может считаться более экологически чистым, чем “серый”, но его производство является весьма дорогостоящим [8, 9, 14, 18]. Разрабатываются и другие способы получения “чистого” водорода, например такие, как термokatалитический и плазменный пиролиз метана с получением “бирюзового” водорода и твердого углерода, а также способы, основанные на реакции металлов (алюминий, магний) с водяным паром [1, 19–22].

Самым дешевым, но наименее экологичным способом получения водорода является газификация каменного (бурого) угля [23–25]. Полученный таким способом водород называют “коричневым” (“бурым”). Степень углеродной нейтральности этого способа можно повысить, если вместо угля газифицировать биомассу. Биомассу относят к возобновляемым и углеродно-нейтральным топливам, так как ежегодно происходит увеличение объема биомассы, а рост последней сопровождается поглощением CO_2 из воздуха [26–28].

Общим недостатком процессов газификации возобновляемых топлив является наличие в получаемых продуктах, помимо углекислого газа, монооксида углерода, водорода, метана, этилена и других газообразных веществ, а также некоторого количества смол, образующихся при термическом разложении топлив [29]. Требования, предъявляемые к содержанию смол в используемых в современной промышленности газообразных топливах и синтез-газе, весьма высоки. Например, для выработки электроэнергии с помощью современных газовых двигателей содержание смол должно быть не более 100 мг/м^3 , для топливных ячеек — менее 100 ppm, а для осуществления синтеза Фишера–Тропша (каталитический процесс, используемый для получения жидких углеводородов) — менее 1 ppm [30, 31].

Ни один из существующих методов газификации биомассы не позволяет гарантировать необходимых пределов содержания смол в получаемых газообразных продуктах, поэтому перед их использованием необходима дополнительная очистка от пиролизных смол. Одним из перспективных методов очистки на данный момент является термохимическая конверсия смол в синтез-газ, так как она позволяет не только очищать газ от смол, но и преобразовывать их в дополнительное количество синтез-газа. Наиболее простым вариантом термохимической конверсии является парциальное окисление пиролизных смол, которое при использовании нестехиометрических (недостаточных) количеств окислителя позволяет преобразовать пиролизные смолы в компоненты синтез-газа. Очевидное преимущество данного способа конверсии — возможность за счет тепловыделения при парциальном окислении смол провести процесс без дополнительных затрат энергии. Сочетание методов газификации биомассы с последующей окислительной конверсией продуктов пиролиза предложено и экспериментально исследовано в работе [32]. Показано, что можно получить газообразные продукты газификации древесины практически без содержания жидких продуктов пиролиза.

Цель настоящей работы — термодинамическая оценка оптимальных условий получения водорода и синтез-газа при окислительной конверсии продуктов пиролиза древесины при атмосферном давлении.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Для исследования многокомпонентных химических систем используются расчеты на основе моделей термодинамического равновесия, которые подробно описаны в литературе [33, 34]. Как правило, применяются два подхода для расчета параметров термодинамического равновесия изолированных многокомпонентных систем: по-

иск минимума свободной энергии Гиббса [35, 36] или решение задачи установления состояния системы, характеризующегося максимальной энтропией. Оба эти подхода являются равнозначными.

Для определения оптимальных условий получения газообразных продуктов с максимальным содержанием водорода проведен термодинамический расчет характеристик процесса конверсии продуктов пиролиза древесины с помощью программного комплекса TERRA [34] при различной температуре. Рассчитывали систему, состоящую из продуктов пиролиза древесины (брутто-формула $C_1H_{1.48}O_{0.58}$, взятая из [37]), азота и кислорода, варьируя содержания водяного пара ($[H_2O] = 0$ и 10 об.%) и кислорода в смеси с азотом ($[O_2] = 21$ и 100 об.%). Коэффициент избытка топлива (φ), равный отношению количества кислорода, необходимого для полного окисления пиролизной смолы, к подаваемому количеству кислорода, изменяли в диапазоне от 2 до 10. Богатые топливные смеси имеют коэффициент избытка топлива больше единицы, а при $\varphi = 1$ происходит полное окисление продуктов пиролиза древесины до углекислого газа и воды. В расчетах задавали давление, равное атмосферному (0.1 МПа). Для заданного состава смеси в результате расчетов получали равновесный состав продуктов при определенной температуре. Температуру снизу ограничивали значением в 1000 К, так как при низких значениях температуры скорости химических реакций снижаются и термодинамическое равновесие будет достигаться за большее время [38–40].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Конверсия продуктов пиролиза древесины с воздухом

Рассмотрим случай окислительной конверсии продуктов пиролиза древесины с воздухом. В общем случае продукты газификации древесины содержат как газообразные вещества, так и продукты ее пиролиза. В работе [37] показано, что выход продуктов пиролиза при газификации древесины составляет до 66 мас.%, включая воду, поэтому рассчитываем характеристики процесса конверсии только продуктов пиролиза древесины.

На рис. 1а представлены зависимости мольного содержания продуктов конверсии от коэффициента избытка топлива φ при значении температуры в конверторе 1000 К. Увеличение коэффициента избытка топлива от 2 до 4 приводит к росту концентрации монооксида углерода с 15 до 28 об.%. При дальнейшем увеличении значения φ концентрация СО плавно снижается. Концентрация водорода растет с увеличением φ и достигает 29 об.% при $\varphi = 10$. Содержание паров воды и диоксида углерода снижается с ростом φ до 4 и далее

Таблица 1. Концентрации основных веществ конверсии продуктов пиролиза древесины без воздуха при 1300 К

| $[H_2O]$, моль.% | $[H_2]$, моль.% | $[CO]$, моль.% | $[C_{(c)}]$, моль.% |
|----------------------|---------------------|--------------------|-------------------------|
| 0 | 42.1 | 33.1 | 24.3 |
| 10 | 46.7 | 38.5 | 14.3 |

выходит на постоянный уровень. При $\varphi > 3$ в продуктах появляется конденсированный углерод ($C_{(c)}$). В одном кубическом метре продуктов конверсии может содержаться примерно 500 г конденсированного углерода при $\varphi = 10$. С учетом того, что древесина считается углеродно-нейтральным топливом, режимы конверсии продуктов ее пиролиза с получением конденсированного углерода можно условно считать процессами, приводящими к изъятию CO_2 из общего углеродного цикла (при условии выделения и использования или захоронения углерода).

На рис. 1б представлены зависимости мольного содержания продуктов конверсии от коэффициента избытка топлива φ при значении температуры в конверторе 1300 К. Рост температуры приводит к увеличению содержания СО и водорода и снижению содержания диоксида углерода и паров воды в продуктах конверсии. Увеличение значения φ от 2 до 5 приводит к росту концентрации монооксида углерода с 22 до 38 об.%. При дальнейшем увеличении φ концентрация СО немного снижается. Концентрация водорода растет с увеличением φ и достигает 33 об.% при $\varphi = 10$. Содержание паров воды и диоксида углерода снижается до нуля с ростом значения φ до 5. При $\varphi > 5$ в продуктах появляется конденсированный углерод. При увеличении температуры конверсии режимы с образованием конденсированного углерода наблюдаются в области значений φ , соответствующих более богатым смесям.

Если проводить конверсию продуктов пиролиза древесины при температуре 1300 К без добавления воздуха, то максимальное содержание водорода, СО и конденсированного углерода в продуктах составит соответственно 42.1, 33.1 и 24.3 об.% (табл. 1). Таким образом, из 100 г пиролизных смол образуется 22.2 г конденсированного углерода. Однако в этом случае на проведение конверсии требуется подвод энергии извне.

Конверсия продуктов пиролиза древесины с воздухом и водяным паром

Добавление паров воды при конверсии может приводить к снижению температуры и увеличению содержания водорода в продуктах. На рис. 1в представлены зависимости мольного содержания продуктов конверсии от коэффициента избытка

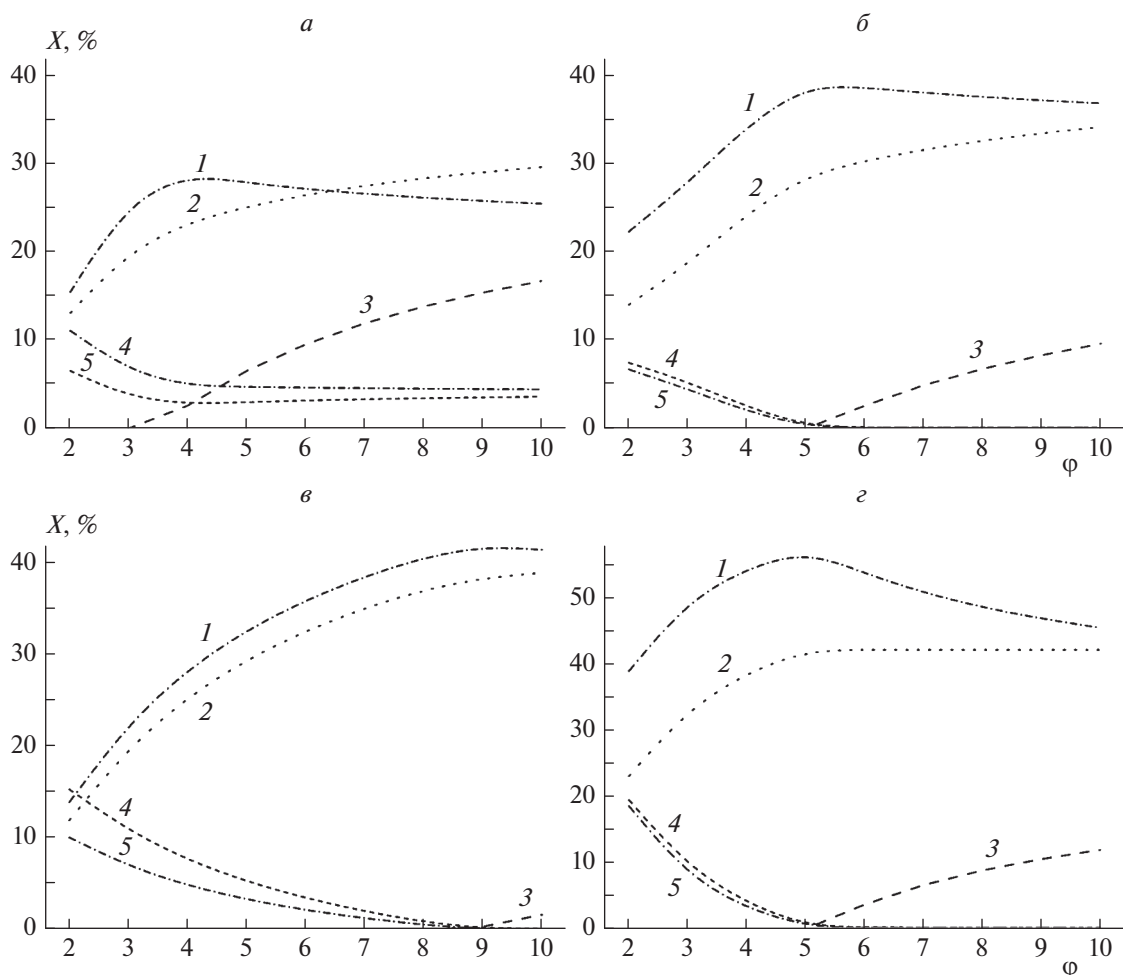


Рис. 1. Зависимости мольного содержания продуктов конверсии (X) от коэффициента избытка топлива ϕ для пиролизной смолы брутто-формулы $C_1H_{1.48}O_{0.58}$: *а* – при 1000 К, $[H_2O] = 0$ и $[O_2] = 21$ об.%; *б* – при 1300 К, $[H_2O] = 0$ и $[O_2] = 21$ об.%, *в* – при 1300 К, $[H_2O] = 10$ об.% и $[O_2] = 21$ об.%; *г* – при 1300 К, $[H_2O] = 0$ и $[O_2] = 100$. Кривые: 1 – CO, 2 – H_2 , 3 – $C_{(c)}$, 4 – H_2O , 5 – CO_2 .

топлива ϕ при содержании паров воды 10 об.% в смеси с воздухом и значении температуры в конверторе 1300 К. При добавлении паров воды режимы с образованием конденсированного углерода реализуются только при $\phi > 9$, т.е. для очень богатых смесей. С увеличением значения ϕ до 10 содержание CO и водорода растет соответственно до 41 и 38 об.%, а содержание паров воды и диоксида углерода снижается до нуля. Добавление паров воды приводит к увеличению содержания водорода в продуктах.

Аналогичный результат получен и при конверсии продуктов пиролиза древесины без добавления воздуха (табл. 1). Если проводить конверсию продуктов пиролиза древесины при температуре 1300 К и добавлении 10 об.% паров воды, то максимальное содержание водорода, CO и конденсированного углерода в продуктах составит соответственно 46,7, 38,5 и 14,3 об.% (табл. 1). В этом слу-

чае из 100 г пиролизных смол образуется 12,7 г конденсированного углерода.

Конверсия продуктов пиролиза древесины с кислородом

Использование чистого кислорода вместо воздуха при окислительной конверсии позволяет получать продукты, не разбавленные азотом. На рис. 1г представлены зависимости мольного содержания продуктов кислородной конверсии от коэффициента избытка топлива ϕ при значении температуры в конверторе 1300 К. Зависимости содержания продуктов конверсии от ϕ аналогичны случаю воздушной конверсии (см. рис. 1б). Максимальное содержание CO и водорода составляет соответственно 56 и 42 об.%. Содержание этих веществ выше, чем для случая воздушной конверсии (см. рис. 1б), за счет отсутствия разбавления продуктов азотом. Однако если в

Таблица 2. Концентрации (в об.%) основных компонентов конверсии продуктов пиролиза древесины

| φ | Температура конверсии, К | [CO ₂] | | [N ₂] | | [CO] | | [CH ₄] | | [H ₂] | |
|------|--------------------------|--------------------|-------|-------------------|-------|-------|-------|--------------------|-------|-------------------|-------|
| | | эксп. | расч. | эксп. | расч. | эксп. | расч. | эксп. | расч. | эксп. | расч. |
| 1.67 | 1200 | 15.3 | 12.4 | 65.6 | 64.2 | 14.1 | 14.0 | 0.8 | 0 | 2.8 | 8.8 |
| 1.43 | 1225 | 16.6 | 14.5 | 66.5 | 69.7 | 13.6 | 10.1 | 0.3 | 0 | 1.8 | 5.8 |

конвертор с продуктами пиролиза поступают газообразные продукты воздушной газификации древесины, то разбавление азотом тоже будет происходить, но в меньшей степени. Поэтому кислородную конверсию следует применять для продуктов пиролиза, отделенных от газообразных продуктов газификации древесины.

В табл. 2 представлено сравнение расчетных и экспериментальных данных по равновесным продуктам конверсии пиролизных смол древесины. В работе [32] проведено экспериментальное исследование воздушной конверсии продуктов газификации древесины. В реакторе фильтрационного горения происходила воздушная газификация сосновой древесины, продукты которой далее направлялись в конвертор, куда подавалось дополнительное количество воздуха для проведения окислительной конверсии продуктов пиролиза древесины. Из данных, приведенных в табл. 2, видно, что с уменьшением коэффициента избытка топлива температура в конверторе увеличивается за счет более полного окисления. Расчетный состав продуктов конверсии близок к составу продуктов конверсии, полученному в экспериментах, за исключением содержания водорода. Это можно объяснить тем, что в экспериментах не успевает установиться термодинамическое равновесие. Однако в целом, расчеты позволяют количественно оценивать характеристики окислительной конверсии продуктов пиролиза древесины.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для определения оптимальных условий получения газообразных продуктов с максимальным содержанием водорода проведен термодинамический расчет характеристик процесса окислительной конверсии продуктов пиролиза древесины. Расчеты позволяют количественно оценивать эти характеристики. Увеличение коэффициента избытка топлива, так же как и температуры конверсии, приводит к росту концентраций монооксида углерода и водорода. Добавление паров воды при фиксированной температуре конверсии приводит к увеличению содержания водорода в продуктах.

Если проводить конверсию продуктов пиролиза древесины при температуре 1300 К без добавления воздуха, то максимальное содержание водорода, СО и конденсированного углерода в продуктах составит соответственно 42.1, 33.1 и

24.3 об.%. Из 100 г пиролизных смол образуется 22.2 г конденсированного углерода. Однако в этом случае для проведения конверсии требуется подвод энергии извне.

Использование чистого кислорода при окислительной конверсии продуктов пиролиза позволяет получать продукты, не разбавленные азотом. Однако кислородную конверсию следует применять для продуктов пиролиза, отделенных от газообразных продуктов газификации древесины, содержащих в своем составе азот. При этом максимальное содержание СО и водорода достигает соответственно 56 и 42 об.%.

С учетом того, что древесина считается углеродно-нейтральным топливом, режимы конверсии продуктов ее пиролиза с получением конденсированного углерода (биококса) имеют отрицательный углеродный след, поскольку получаемый биококс является хорошим удобрением и депонированный в почву углерод изымается из атмосферного цикла.

Исследование выполнено в рамках госзадания (регистрационный номер АААА-А19-119022690098-3).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шмелев В.М., Арутюнов В.С., Янг Х., Им Ч. // Хим. физика. 2017. Т. 36. № 5. С. 38; <https://doi.org/10.7868/S0207401X17050090>
2. Oliveira A.M., Beswick R.R., Yan Y. // Curr. Opin. Chem. Eng. 2021. V. 33. ID 100701; <https://doi.org/10.1016/j.coche.2021.100701>
3. Sunny N., Mac Dowell N., Shah N. // Energy Environ. Sci. 2020. V. 13. № 11. P. 4204; <https://doi.org/10.1039/D0EE02016H>
4. Арутюнов В.С., Стрекова Л.Н. // Нефтегазохимия. 2021. № 1–2. С. 8; <https://doi.org/10.24412/2310-8266-2021-1-2-8-11>
5. Алдошин С.М., Арутюнов В.С., Савченко В.И. и др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 5. С. 46; <https://doi.org/10.31857/S0207401X21050034>
6. Megía P.J., Vizcaíno A.J., Calles J.A., Carrero A. // Energy Fuels. 2021. V. 35. № 20. P. 16403; <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.1c02501>
7. Newborough M., Cooley G. // Fuel Cells Bulletin. 2020. V. 2020. № 11. P. 16; [https://doi.org/10.1016/S1464-2859\(20\)30546-0](https://doi.org/10.1016/S1464-2859(20)30546-0)

8. *Kakoulaki G., Kougiass I., Taylor N. et al.* // Energy Convers. Manag. 2021. V. 228. ID 113649; <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.113649>
9. *Dawood F., Anda M., Shafiullah G.M.* // Intern. J. Hydrog. Energy. 2020. V. 45. № 7. P. 3847; <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.12.059>
10. *Scamman D., Newborough M.* // Ibid. 2016. V. 41. № 24. P. 10e080; <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.04.166>
11. *Karaca A.E., Dincer I., Gu J.* // Ibid. 2020. V. 45. № 41. P. 22e148; <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.06.030>
12. *Якубсон К.И.* // ЖПХ. 2020. Т. 93. № 12. С. 1675; <https://doi.org/10.31857/S0044461820120014>
13. *Miller H.A., Bouzek K., Hnat J. et al.* // Sustain. Energy Fuels. 2020. V. 4. P. 2114; <https://doi.org/10.1039/c9se01240k>
14. *Zhang H., Sun Z., Hu Y. H.* // Renew. Sustain. Energy Rev. 2021. V. 149. P. 111330; <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111330>
15. *Ripoll N., Salgansky E., Toledo M.* // Intern. J. Heat Mass Transf. 2021. V. 177. ID 121472; <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121472>
16. *Boretti A.* // Intern. J. Hydrog. Energy. 2021. V. 46. № 46. P. 23988; <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.04.182>
17. *Fierro M., Requena P., Salgansky E., Toledo M.* // Chem. Eng. J. 2021. ID 130178; <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.130178>
18. *Howarth R.W., Jacobson M.Z.* // Energy Sci. Eng. 2021. V. 9. № 10. P. 1676; <https://doi.org/10.1002/ese3.956>
19. *Филиппов С.П., Ярославцев А.Б.* // Успехи химии. 2021. Т. 90. № 6. С. 627; <https://doi.org/10.1070/RCR5014>
20. *Kersch F., Stary A., Gleis S. et al.* // Intern. J. Hydrog. Energy. 2021. V. 46. № 38. P. 19897; <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.03.114>
21. *Harun K., Adhikari S., Jahromi H.* // RSC Advances. 2020. V. 10. № 67. P. 40882; <https://doi.org/10.1039/D0RA07440C>
22. *Rin T., Sangwichien C., Yamsaengsung R., Reungpeera-kul T.* // Intern. J. Hydrog. Energy. 2021. V. 46. № 56. P. 28e450. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.06.101>
23. *Chen Q.Q., Lv M., Gu Y. et al.* // Joule. 2018. V. 2. № 4. P. 607; <https://doi.org/10.1016/j.joule.2018.02.015>
24. *Клишин В.И., Патраков Ю.Ф., Мандров Г.А.* // Химия твердого топлива. 2013. № 5. С. 51; <https://doi.org/10.7868/S0023117713050058>
25. *Midilli A., Kucuk H., Topal M. E., Akbulut U., Dincer I.* // Intern. J. Hydrog. Energy. 2021. V. 46. № 50. P. 25385; <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.05.088>
26. *Lee R.P., Seidl L.G., Meyer B.* // Clean Energy. 2021. V. 5. № 2. P. 180; <https://doi.org/10.1093/ce/zkab002>
27. *Goede A.P.H.* // EPJ Web Conf. EDP Sci. 2018. V. 189. P. 00010; <https://doi.org/10.1051/epjconf/201818900010>
28. *Prabowo B., Aziz M., Umeki K. et al.* // Appl. Energy. 2015. V. 158. P. 97; <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2015.08.060>
29. *Podlesniy D.N., Zaichenko A.Yu., Tsvetkov M.V. et al.* // Fuel. 2021. V. 298. ID 120862; <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.120862>
30. *Richardson Y., Blin J., Julbe A.* // Prog. Energy Combust. Sci. 2012. V. 38. № 6. P. 765; <https://doi.org/10.1016/j.peccs.2011.12.001>
31. *Shen Y., Yoshikawa K.* // Renew. Sustain. Energy Rev. 2013. V. 21. P. 371; <https://doi.org/10.1016/j.rser.2012.12.062>
32. *Кислов В.М., Глазов С.В., Салганская М.В., Пилипенко Е.Н., Цветкова Ю.Ю.* // ЖПХ. 2021. Т. 94. № 3. С. 363; <https://doi.org/10.31857/S0044461821030117>
33. *Петров В.В., Варзарев Ю.Н., Старникова А.П., Абдуллин Х.А.* // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 2. С. 37; <https://doi.org/10.31857/S0207401X20020089>
34. *Трусов Б.Г.* // Матер. XIV Междунар. конф. по химической термодинамике. Спб: НИИХ СПбГУ, 2002. С. 483.
35. *Antzara A., Heracleous E., Bukur D.B., Lemonidou A.A.* // Energy Procedia. 2014. V. 63. P. 6576; <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2014.11.694>
36. *Tabrizi F.F., Mousavi S.A.H.S., Atashi H.* // Energy Convers. Manage. 2015. V. 103. P. 1065; <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2015.07.005>
37. *Salgansky E.A., Kislov V.M., Glazov S.V., Salganskaya M.V.* // J. Combustion. 2016. ID 9637082; <https://doi.org/10.1155/2016/9637082>
38. *Козлов С.Н., Тереза А.М., Медведев С.П.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 8. С. 34; <https://doi.org/10.31857/S0207401X21080070>
39. *Tereza A.M., Medvedev S.P., Smirnov V.N.* // Acta Astronaut. 2020. V. 176. P. 653; <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2020.03.045>
40. *Тереза А.М., Агафонов Г.Л., Андержанов Э.К. и др.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 8. С. 56; <https://doi.org/10.31857/S0207401X21080136>