

## ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ

УДК 544.45

### КРИТЕРИЙ ПЕРЕХОДА В ДЕТОНАЦИЮ ПРИ СВОБОДНОМ РАСПРОСТРАНЕНИИ ПЛАМЕНИ

© 2022 г. А. Д. Киверин<sup>1\*</sup>, И. С. Медведков<sup>1</sup>, И. С. Яковенко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, Москва, Россия

\*E-mail: alexeykiverin@gmail.com

Поступила в редакцию 15.01.2022;  
после доработки 05.04.2022;  
принята в печать 20.04.2022

В работе проведен анализ критических условий, достигаемых непосредственно перед переходом горения в детонацию при свободном распространении пламени в водород-кислородной смеси в неограниченном объеме. Продемонстрировано, что параметр, характеризующий степень развитости поверхности пламени, не является достаточным для определения условий перехода горения в детонацию. В первую очередь это связано с тем, что механизм перехода в детонацию полностью определяется эволюцией пламени на стадии, предшествующей переходу. Нелинейный характер развития фронта пламени в ходе его ускорения определяет генерацию ударных волн, распространяющихся в поперечном направлении (вдоль фронта пламени). Взаимодействие этих ударных волн с фронтом приводит к их усилению и создает условия для формирования детонационной волны. При этом возможны сценарии, когда достигается сравнительно высокая степень развитости поверхности, но интенсивность процесса оказывается недостаточной для генерации сильных ударных волн, способных привести к переходу в детонацию.

*Ключевые слова:* нестационарное горение, свободное пламя, ускорение пламени, переход в детонацию, численное моделирование, водород.

DOI: 10.31857/S0207401X2211005X

#### ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в энергетике и промышленности все более широкое применение находят газообразные топлива, включая топлива на основе водорода, привлекающие внимание в рамках стратегий декарбонизации. Важной задачей при этом является обеспечение безопасности при хранении, транспортировке и утилизации газообразных горючих. В большей степени это касается водорода, как наиболее химически активного газообразного топлива, характеризующего наименьшей детонационной стойкостью. Утечка больших объемов газа приводит к формированию облаков взрывоопасной смеси в результате перемешивания его с воздухом, что может стать основной причиной крупной техногенной аварии. При этом для прогнозирования рисков и создания мер подавления динамических и тепловых воздействий взрыва важно понимать, какие конкретные сценарии могут развиваться в тех или иных условиях.

Наиболее опасным из вероятных сценариев развития газового взрыва принято считать формирование и распространение детонации [1]. При этом благоприятным условием для форми-

рования детонации является замкнутое пространство. Хорошо изучены сценарии, когда волна горения, распространяясь в канале, ускоряется, и горение переходит в детонацию [2]. При этом усложнение геометрии канала способствует турбулизации потока, интенсификации процесса ускорения пламени и сокращению пространственно-временных масштабов, на которых происходит переход в детонацию [3]. Физика перехода горения в детонацию (ПГД) в каналах и загроможденных объемах хорошо разработана на экспериментальном [2–4] и расчетно-теоретическом уровнях [5]. Вопрос же об условиях перехода в детонацию в свободном пространстве остается открытым. При этом оценка рисков перехода горения в детонацию в открытых объемах является принципиальной и актуальной задачей. Более того, сценарий такого перехода при свободном распространении пламени часто упоминается при интерпретации подобных процессов, протекающих в атмосфере звезд, (взрывов сверхновых) [6].

Несмотря на то, что в современной науке о горении и детонации сформированы представления о базовых механизмах, определяющих, с одной стороны, ускорение свободных расходящихся пламен [7], а с другой – необходимое условие

для перехода в детонацию, связанное с совместным ростом скорости пламени и давления [8], полной картины того, по какому сценарию развивается переход горения в детонацию в неограниченном пространстве, и каковы критерии перехода, на сегодняшний день не существует. Это, в свою очередь, обусловлено отсутствием экспериментальных сведений о переходе горения в детонацию при свободном распространении пламени. Фактически, экспериментальное исследование этого процесса зафиксировано только в одной работе [9], причем для весьма экзотического случая – водород-кислородной смеси при повышенном давлении (10 атм). Следует ожидать, что в таких условиях горение столь высокоактивной горючей смеси сопровождается интенсивным развитием гидродинамической неустойчивости фронта пламени, что и представляется основным механизмом, ответственным за ускорение пламени и связанным с ним рост давления [10].

В недавнем цикле работ [11–13] была показана возможность моделирования процесса перехода горения в детонацию в свободном пространстве путем учета в одномерной газодинамической модели степени развитости поверхности фронта пламени. Для этого авторы увеличивали исходниковые члены, ответственные за учет химических превращений, в уравнениях баланса энергии и масс отдельных компонент смеси в  $\Sigma^2$  раз ( $\dot{w}_{mod} = \Sigma^2 \dot{w}$ ), где  $\Sigma$  – степень развитости поверхности пламени (удельная площадь фронта). В результате скорость пламени ( $D \sim \dot{w}^{1/2}$  [14]) возрастала в  $\Sigma$  раз, что соответствует классическим представлениям о прямой зависимости скорости пламени от площади его поверхности ( $D/D_0 = S_f/S_R = \Sigma$ , где  $D_0$  – нормальная скорость волны горения без учета многомерных эффектов,  $S_f$  – истинная площадь поверхности фронта,  $S_R$  – площадь эквивалентного, идеально сферического пламени) [15]. Расчеты в рамках такой модели позволили авторам провести параметрическое исследование процесса перехода горения в детонацию при свободном распространении пламени, используя в качестве управляющего параметра степень развитости поверхности пламени ( $\Sigma$ ). Увеличение параметра  $\Sigma$  согласно автомодельному закону роста площади фронта пламени [7] в рамках предложенной модели может способствовать повышению скорости пламени и связанному с этим росту давления на фронте горения. Итогом этого процесса становится переход горения в детонацию при достижении некоего критического значения параметра  $\Sigma_{cr}$  по механизму, подобному тому, что наблюдается при ускорении пламени в канале, и впервые предложенному в работе [16].

Таким образом, зная закон эволюции фронта пламени [7] и согласованные с ним ускорение фронта и рост давления, можно оценить критиче-

ское значение  $\Sigma_{cr}$  и соответствующий ему радиус фронта пламени – расстояние от точки инициации, на котором следует ожидать перехода в детонацию. Стоит, однако, отметить, что проведенные в работах [10, 17] двумерные расчеты, находящиеся в хорошем количественном согласии с экспериментальными данными [9], указывают на то, что важную роль в формировании детонационной волны играют механизмы, связанные с формированием и эволюцией волн сжатия на фоне развивающегося горения. В случае развитой многомерной структуры фронта пламени, излучаемые с него волны сжатия взаимодействуют с самим фронтом горения, усиливаются и в конечном итоге локально создаются условия для формирования детонационной волны [17, 18]. При этом однозначная связь параметра  $\Sigma$  с этим процессом неочевидна.

В настоящей работе проведен анализ процесса перехода горения в детонацию в условиях, моделирующих свободное распространение пламени. За основу взята постановка задачи, предложенная в работе [18], при этом проведенный анализ в первую очередь сосредоточен на выявлении связи степени развитости поверхности пламени ( $\Sigma$ ) с другими параметрами процесса перехода в детонацию. Работа выполнена методами численного моделирования.

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Как установлено ранее в работе [18], переход горения в детонацию при свободном распространении пламени с хорошей степенью достоверности воспроизводится в приближении плоского фронта, искусственно возмущенного в начальный момент времени (рис. 1). При этом важно отметить, что начальное возмущение играет одну из ключевых ролей, так как при развитии плоского фронта пламени не возникает естественных механизмов его локального растяжения и генерации на поверхности пламени спектра неустойчиво растущих мод, как это имеет место при развитии сферического или цилиндрического пламени [19]. Для детального параметрического анализа процесса ускорения пламени, согласованного с ростом его поверхности, будем варьировать амплитуду начального возмущения ( $A$ ) при фиксированной длине волны возмущения ( $\lambda$ ), равной 0.25 мм. В качестве примера рассмотрим горение эквимолярной водород-кислородной смеси при повышенном давлении 10 атм, в которой переход в детонацию при свободном распространении пламени наблюдался экспериментально [9].

Газодинамика процесса рассчитывается на основе полной системы уравнений динамики вязкой сжимаемой среды с учетом теплопроводности, многокомпонентной диффузии и экзотермических реакций [20]. Расчеты проводятся с использовани-

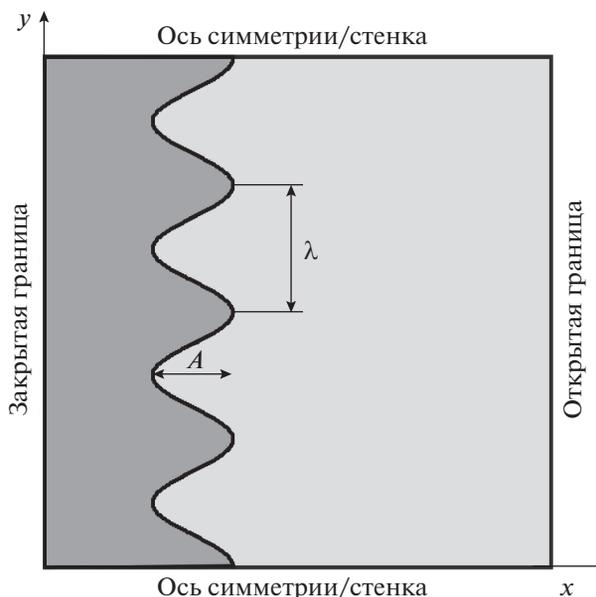
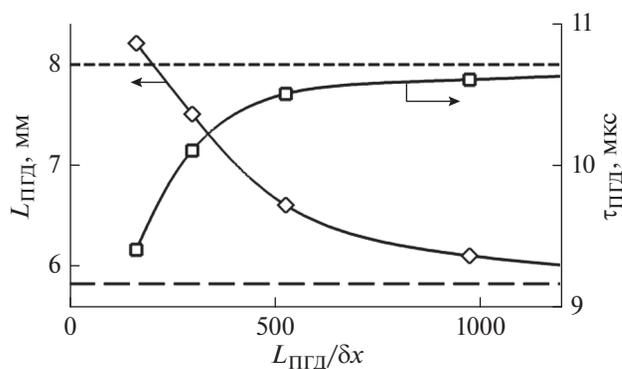


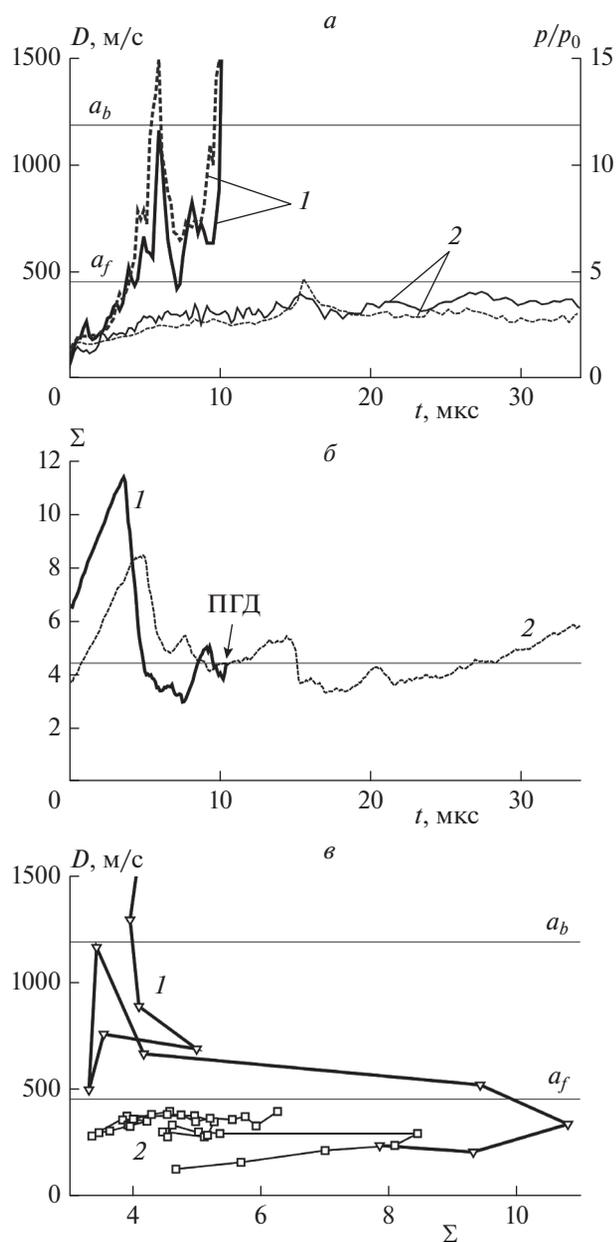
Рис. 1. Постановка задачи.

ем хорошо зарекомендовавшего себя [20] вычислительного алгоритма на основе бездиссипативной вычислительной методики КАБАРЕ, представленной в работе [21]. Для воспроизведения количественных особенностей горения принципиально учитывать детальный кинетический механизм окисления топлива [22]. В связи с этим в настоящей работе для описания процесса горения водород-кислородной смеси используется детальный кинетический механизм, предложенный в работе [23]. Как отмечено в недавней монографии [24], для корректного численного воспроизведения процессов, связанных с генерацией ударных волн, их взаимодействием с фронтами реакций и последующим формированием волн детонации, крайне важно подробно разрешать зону реакции на используемой расчетной сетке. Для исключения из рассмотрения схемных эффектов и демонстрации того, что рассматриваемый численно процесс перехода в детонацию обусловлен исключительно физическими механизмами, была проведена серия расчетов при амплитуде начального возмущения  $A = 0.8$  мм с использованием различных расчетных сеток.

Проведенное исследование (рис. 2) указывает на сходимость решения при размере ячейки  $\delta x = 12.5$  мкм со степенью сходимости, равной 1.88 – по времени перехода в детонацию и 1.48 – по длине перехода. При этом при  $\delta x = 12.5$  мкм погрешность определения этих двух параметров по сравнению с оценкой истинного решения составляет 1.9 и 13% соответственно. Здесь важно отметить, что на качественном уровне на расчетных сетках с размером расчетной ячейки  $\delta x < 50$  мкм воспроиз-

изводится один и тот же режим развития горения на всех стадиях, включая переход в детонацию. С учетом сходимости решения стоит отметить также, что выбранный расчетный алгоритм [21] лишен одного из основных недостатков большинства разностных схем и разрешает фронт ударной волны без схемного размазывания на несколько (как правило, 5–6) расчетных ячеек. В связи с этим при использовании выбранной расчетной методики не наблюдается искусственного объединения фронта реакции и ударной волны в детонационный комплекс даже при использовании относительно грубых ячеек. Тем не менее такой эффект имеет место при использовании грубой сетки с размером ячейки  $\delta x = 100$  мкм. Ниже

Рис. 2. Зависимости  $L_{ПГД}$  и  $\tau_{ПГД}$  перехода в детонацию от размера ячейки расчетной сетки. Горизонтальные штриховые линии показывают оценку истинного решения.



**Рис. 3.** а – Хронограммы скорости пламени  $D$  (сплошные линии) и давления  $p$  (штриховые линии); б – зависимость степени развитости поверхности пламени  $\Sigma$  от времени; в – эволюция процесса на диаграмме  $D$ – $\Sigma$ : 1 – начальная амплитуда возмущения  $A = 0.8$  мм, 2 –  $A = 0.4$  мм;  $a_f$  и  $a_b$  – скорости звука в холодной смеси и продуктах горения соответственно.

представлены результаты анализа расчетов, проведенных на сетке с размером  $\delta x = 12.5$  мкм.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Представим описание основных стадий развития пламени в принятой постановке задачи для двух начальных амплитуд возмущений:  $A = 0.8$  мм

и  $A = 0.4$  мм (варианты 1 и 2 на рис. 3 соответственно). На начальной стадии скорость пламени нарастает экспоненциально совместно с амплитудой возмущения. При этом наблюдается линейный рост площади поверхности фронта пламени (рис. 3б). Линейная стадия роста неустойчивости по истечении времени (4–6 мкс) сменяется нелинейной стадией стабилизации. На этой стадии интенсивно сгорает смесь внутри вогнутых частей фронта пламени, на фоне чего происходит генерация волн сжатия, распространяющихся поперек направления распространения пламени [18]. В ходе развития этой и следующей стадий пламя продолжает ускоряться, а волны сжатия усиливаются при взаимодействии с разнесенными в пространстве участками фронта. В связи с этим хронограммы давления (рис. 3а) демонстрируют локальные пики давления. Следует отметить, что важную роль в развитии волнового процесса вдоль поверхности фронта пламени играет асимметрия в начальных условиях, моделирующая кривизну поверхности при свободном распространении пламени от точечного источника [18]. При этом поверхность пламени, подверженная воздействию поперечных волн сжатия, претерпевает структурные изменения, что отражает хронограмма параметра  $\Sigma$  (рис. 3б). На стадии стабилизации сильно растянутый в пространстве фронт пламени сглаживается, что ведет к уменьшению значения  $\Sigma$ . Далее параметр  $\Sigma$  меняется немонотонным образом под действием поперечных волн сжатия.

Отметим, что на основании рассмотренных примеров крайне сложно выделить критическое значение  $\Sigma_{cr}$  в отрыве от поведения скорости пламени и характера взаимодействия фронта горения с волнами сжатия. Так, анализ рис. 3б показывает, что в случае  $A = 0.4$  мм (меньшей амплитуды начального возмущения) площадь фронта в момент времени 34 мкс оказывается в полтора раза больше, чем в случае  $A = 0.8$  мм в момент перехода в детонацию (точка ПГД на рис. 3б). При этом целесообразно отметить, что площадь фронта пламени на линейной стадии в обоих случаях по величине в несколько раз превышает значение в точке ПГД, но тем не менее перехода в детонацию на линейной стадии не происходит. В этом случае в результате сжатия смеси перед экспоненциально ускоряющимся фронтом пламени формируется ударная волна на некотором расстоянии перед фронтом. Более того, достигаемая на этой стадии скорость пламени – дозвуковая, и механизма взаимодействия пламени с зоной сжатия, которое бы смогло обеспечить совместный рост скорости горения и давления, нет.

Рассмотрим более подробно развитие процесса в случае  $A = 0.8$  мм, в котором наблюдается переход в детонацию. Вследствие начальной высокой интенсивности процесса в ходе стадии стабилиза-

ции пламя ускоряется до скорости звука  $a_f$  в холодной смеси перед фронтом пламени (рис. 3а). В связи с этим возникает естественное ограничение на рассеяние волн сжатия в направлении движения фронта. Таким образом, имеет место запираание волн внутри фронта пламени. При этом волны сжатия, проходя последовательно через разнесенные в пространстве участки фронта, непрерывно усиливаются, и каждое следующее взаимодействие волны сжатия с фронтом пламени ведет к формированию все более сильной ударной волны. Пламя при взаимодействии с волнами сжатия также ускоряется, что отражено наличием пиков на хронограмме скорости пламени (рис. 3а). В случае, когда в ходе очередного взаимодействия ударной волны с фронтом горения локальные скорости ударной волны и фронта пламени превышают скорость звука в продуктах горения ( $a_b$ ), имеет место их совместное распространение. При этом ударная волна, локализованная в зоне экзотермической реакции, продолжает усиливаться, и в итоге формируется ударная волна, способная инициировать за своим фронтом детонацию.

В случае  $A = 0.4$  мм процесс развивается аналогичным образом, в том числе происходит формирование поперечных волн сжатия и их усиление (см., например, пик давления в момент времени 16 мкс, рис. 3а). Но при этом начальной интенсивности процесса недостаточно для ускорения пламени до скорости звука на рассмотренных масштабах, и эффекта совместного роста скорости горения и давления, достаточных для перехода в детонацию, не наблюдается.

Анализ результатов работ [12, 13] также указывает на важность эффекта сжимаемости в развитии перехода в детонацию. В частности, приведенные авторами работ [12, 13] зависимости скорости пламени  $D$  от удельной площади фронта  $\Sigma$  указывают на то, что при достижении пламенем скорости звука зависимость  $D(\Sigma)$  начинает отклоняться от линейной. Дальнейший рост скорости, связанный с дополнительным растяжением фронта, ведет уже к формированию ударных волн и переходу в детонацию. В отличие от механизма, рассмотренного в настоящей работе, в работах [12, 13] не учтены поперечные волны сжатия, и зависимость  $D(\Sigma)$  имеет монотонный характер вплоть до перехода в детонацию. В случае, когда механизм перехода в детонацию связан с поперечными волнами, такая зависимость может иметь немонотонный характер, как это демонстрирует диаграмма, представленная на рис. 3в. Таким образом, для дальнейшего развития модельных представлений о переходе в детонацию при свободном распространении пламени и критериальной оценки возможности такого перехода необходимо на модельном уровне учитывать многомерные эффек-

ты, связанные с эволюцией поля давления на фоне развивающегося пламени.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные в работе расчеты и их анализ указывают на необходимость совершенствования модельных представлений о переходе в детонацию при свободном распространении пламени и критериальной оценки возможности такого перехода. Таким образом продемонстрировано, что использование в качестве критерия удельной площади поверхности пламени, характеризующей степень развитости поверхности на различных стадиях эволюции пламени, не является достаточным. В первую очередь это обусловлено тем, что механизм перехода в детонацию при свободном распространении пламени связан с генерацией волн сжатия, распространяющихся в направлении вдоль поверхности фронта, и их усилением по механизму термоакустической неустойчивости [18]. Следовательно, без учета многомерных эффектов, связанных с эволюцией поля давления на фоне развивающегося пламени, одномерная модель не может количественно верно предсказать, в какой точке пространства и в какой момент времени произойдет переход в детонацию, и возможен ли он.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ng H.D., Lee J. // J. Loss Prev. Process Ind. 2008. V. 21(2). P. 136.
2. Ciccarelli G., Dorofeev S. // Prog. Energy Combust. Sci. 2008. V. 34(4). P. 499.
3. Фролов С.М. // Хим. физика. 2008. Т. 27. № 6. С. 32.
4. Медведев С.П., Поленов А.Н., Хомик С.В., Гельфанд Б.Е. // Хим. физика. 2010. Т. 29. № 1. С. 58.
5. Киверин А.Д., Яковенко И.С. // Теплофизика высоких температур. 2020. Т. 58. № 4. С. 707.
6. Gordon P.V., Kagan L., Sivashinsky G. // Phys. Rev. E. 2021. V. 103(3). P. 033106.
7. Гостинцев Ю.А., Истратов А.Г., Шуленин Ю.В. // Физика горения и взрыва. 1988. Т. 24. № 5. С. 63.
8. Киверин А.Д., Смыгалина А.Е., Яковенко И.С. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 8. С. 9.
9. Зельдович Я.Б., Розловский А.И. // Докл. АН СССР. 1947. Т. 57. № 4. С. 365.
10. Киверин А.Д., Яковенко И.С., Фортвов В.Е. // Докл. Академии наук. 2019. Т. 489. № 5. С. 461.
11. Kagan L., Sivashinsky G. // Combust. and Flame. 2017. V. 175. P. 307.
12. Koksharov A., Bykov V., Kagan L., Sivashinsky G. // Ibid. 2018. V. 195. P. 163.
13. Koksharov A., Kagan L., Sivashinsky G. // Proc. Combust. Inst. 2021. V. 38(3). P. 3505.

14. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980.
15. Яковенко И.С., Медведков И.С., Киверин А.Д. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 3. С. 85.
16. Liberman M.A., Ivanov M.F., Kiverin A.D. et al. // Acta Astronaut. 2010. V. 67(7-8). P. 688.
17. Kiverin A., Yakovenko I. // Acta Astronaut. 2020. V. 176. P. 647.
18. Kiverin A., Yakovenko I. // Acta Astronaut. 2021. V. 181. P. 649.
19. Liberman M.A., Ivanov M.F., Peil O.E., Valiev D.M., Eriksson L.E. // Phys. Fluids. 2004. V. 16(7). P. 2476.
20. Vukov V., Kiverin A., Koksharov A., Yakovenko I. // Comput. Fluids. 2019. V. 194. P. 104310.
21. Головизнин В.М., Зайцев М.А., Карбасов С.А., Короткин И.А. Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов. М.: Изд-во Моск. ун-та. 2013.
22. Власов П.А., Смирнов В.Н., Тереза А.М. // Хим. физика. 2016. Т. 35. №6. С. 35.
23. Keromnes A., Metcalfe W.K., Heufer K.A. et al. // Combust. and Flame. 2013. V. 160. № 6. P. 995.
24. Liberman M.A. Combustion Physics: Flames, Detonations, Explosions, Astrophysical Combustion and Inertial Confinement Fusion. Cham, Switzerland: Springer Nature, 2021.