

УДК 536.36.-541.12

DOI: 10.53403/9785951505309_2022_27_1_378

Численное исследование перехода к детонации горения водородовоздушной смеси в опытах на установке НТСФ

С помощью кода FIRECON выполнено прямое трехмерное численное моделирование развития турбулентного горения в водородовоздушной смеси. Эволюция этого течения приводит к переходу горения в детонацию при перемещении фронта пламени вдоль трубы с перегородками. Результаты численного моделирования сравниваются с экспериментальными данными, полученными на установке НТСФ.

**О. Г. Синькова, В. П. Стаценко,
Ю. В. Янилкин**

Введение

Одной из важных задач при анализе безопасности атомных электростанций (АЭС) является определение механических нагрузок, возникающих при горении водорода в результате аварии. Уровень механических нагрузок зависит от скорости энерговыделения при горении, которая значительно отличается для разных режимов горения. На практике в зависимости от исходных данных (состав образующейся смеси, размер и геометрия защитной оболочки АЭС) могут реализовываться различные режимы горения – от медленного горения при небольшом превышении предела воспламенения до детонации, включая промежуточные стадии перехода горения в детонацию. Поэтому задача в большей степени сводится к надежному прогнозированию режима горения со всеми количественными характеристиками, необходимыми для расчета механических нагрузок на конструкции. Для геометрически сложных конструкций такая задача трудновыполнима. Однако можно показать, как это было проделано в работе [1], что прямое численное моделирование турбулентного горения является достаточно надежным способом описания перехода к детонации находящейся в конструкции водородовоздушной смеси.

1. Численная методика

Расчеты проводились по коду FIRECON [2], который представляет собой пакет программ, позволяющий численно моделировать в трехмерном пространстве различные режимы горения (от медленного горения до детонации) пароводородовоздушных смесей в замкнутых объемах слож-

ной геометрии с целью оценки максимально возможного (для данного набора исходных параметров) уровня механических нагрузок на твердые стенки – границы объемов. Моделирование осуществляется в декартовой системе координат на сетке, образованной прямыми, параллельными координатным осям, – как правило, кубической.

Код применяется для анализа безопасности АЭС в случае тяжелой аварии на стадии выделения значительных количеств водорода, в частности для расчета нагрузок на гермооболочку, элементы конструкции и оборудование внутри защитной оболочки АЭС при горении и взрыве водородосодержащих смесей.

Код FIRECON функционирует в следующей области допустимых значений исходных параметров:

- начальная температура 20–250 °С;
- начальное давление 0,1–0,4 МПа;
- концентрация водорода 0–100 %;
- концентрация водяного пара 0–100 %.

Методика кода FIRECON основана на методике ЭГАК [3], поэтому «наследует» ее основные особенности:

- конечно-разностная схема написана в неподвижных декартовых координатах;
- счетная сетка прямоугольная, линии сетки параллельны координатным осям;
- применяется трехкомпонентный подход: первый компонент – элементы конструкции, второй – газовая смесь, третий – продукты горения;
- каждый компонент описывается собственным УРС, полным набором термодинамических параметров и объемных долей; в смешанных ячейках они меняются от 0 до 1;
- метод концентраций (VOF) применяется в газодинамике для моделирования движения контактных границ между компонентами;
- модифицированный метод концентраций применяется для моделирования распространения фронта пламени, в результате чего граница между газовой смесью и продуктами горения всегда находится в пределах одной смешанной ячейки;
- скорость распространения фронта вычисляется локально для каждой ячейки исходя из термодинамического состояния газовой смеси и степени турбулизации течения.

2. Постановка задачи

2.1. Постановка эксперимента

Эксперименты [4] выполнялись в Брукхейвенской лаборатории (BNL) на установке HTCF (High-Temperature Combustion Facility). Установка представляет собой трубу с внутренним диаметром $D_0 = 27,3$ см длиной 21,3 м. Ускорение пламени стимулируется препятствиями – дисками толщиной 1,9 см с отверстием с внешним диаметром $D = D_0 = 27,3$ см и внутренним диаметром $d = 20,6$ см, расположенными на расстоянии 27 см друг от друга по всей длине трубы. Для этих параметров показатель блокировки BR (Blockage Ratio) равен $BR = 1 - (d/D_0)^2 = 0,43$. Поджиг осуществляется с конца установки.

Скорость фронта горения лучше всего измерялась фотодиодами, но для слабого горения предпочтительнее использование термопар. Фронт давления измерялся пьезоэлектрическим датчиком, расположенным вблизи конца установки.

2.2. Постановка расчетов

Расчетная область – труба длиной 2130 см, диаметром 27,3 см. Через каждые 27 см трубы помещаются препятствия – диски с отверстием внутри. Граничные условия на поверхностях – «жесткие стенки» со скольжением.

Расчеты выполнены для различных значений объемной доли водорода β_{H_2} , соответствующих различным опытам [4] (табл. 1)*.

Таблица 1

Расчет объемной доли водорода

Вариант расчета	Номер опыта [4]	β_{H_2}	Сетка
1	K132	0,1	N
2	K15	0,1272	N
3	K21	0,158	$2N$
4	K21	0,158	$N/2$
5	K21	0,158	N
6	K11	0,1739	N
7	K9	0,2504	N

Начальное давление $P = 10^5$ Па, начальная температура $T_0 = 20$ °С (кроме точки поджига). Поджиг смеси осуществлялся заданием температуры $T_{i0} = 1072$ °С в одной ячейке в середине торца начального участка трубы ($z = 0$). Счетная сетка, близкая к кубической, с размером ячейки h (см. табл. 1). Далее под расчетом N понимается размер ячейки $h = 0,325$. Вид счетной сетки в поперечном и продольном к оси сечениях показан на рис. 1. Темным цветом выделена вспомогательная непроницаемая область, занятая абсолютно несжимаемым телом.

Для начальной турбулентности условия не задавались, так как достаточно малых возмущений, вызванных взаимодействием волны горения с сеткой и препятствиями.

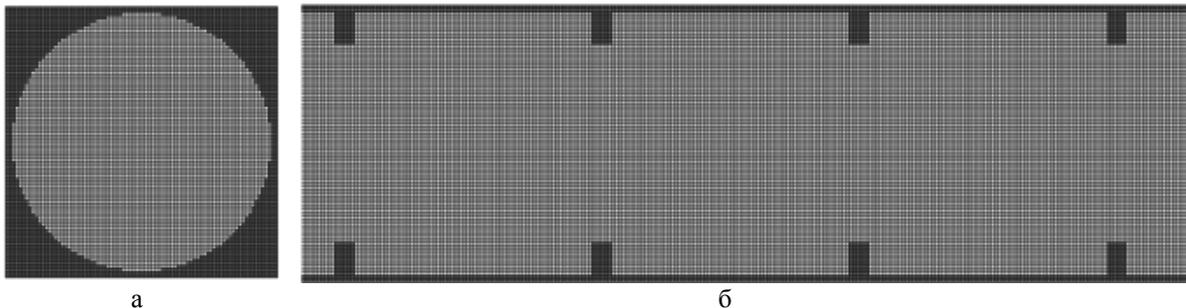


Рис. 1. Вид счетной сетки между препятствиями в поперечном (а) и продольном (б) сечениях

* Всюду, где не указаны единицы измерения величин, подразумевается система СИ: м, кг, с.

3. Некоторые теоретические соотношения

Предположим, что единица объема исходной смеси состоит из n_0 молекул воздуха и водорода с мольной долей β . Температура смеси $T_1 = 300$ К, давление $P_1 = 10^5$ Па. Плотность смеси выражается как

$$\rho_1 = m_p \beta n_0 \mu_{H_2} + m_p (1 - \beta) n_0 (0,79 \mu_{N_2} + 0,21 \mu_{O_2}). \quad (1)$$

Здесь $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27}$ кг – масса протона, $n_0 = 2,7 \cdot 10^{25}$ м⁻³; молекулярная масса [г/моль] водорода, азота и кислорода – соответственно $\mu_{H_2} = 2$, $\mu_{N_2} = 28$, $\mu_{O_2} = 32$. Постоянная адиабаты в смеси $\gamma_1 = 1,4$, средняя молекулярная масса воздуха $\mu_{air} = 0,21 \cdot 32 + 0,79 \cdot 28 = 28,84$ г/моль.

Согласно [5] удельная (на единицу массы стехиометрической смеси) теплота образования газообразной воды $\Delta H^0 = -1,342 \cdot 10^7$ Дж/кг, что практически совпадает с данными [6–8] ($\Delta H^0 = -1,342 \cdot 10^7$ Дж/кг), которые, в свою очередь, близки к аппроксимации данных [7], используемых в УРС методики FIRECON: $\Delta H^0 = -1,327 \cdot 10^7$ Дж/кг). Поэтому теплота реакции, т. е. удельная теплота q , выделяющаяся при сгорании стехиометрической смеси водорода и кислорода, равна $q = -\Delta H^0 = 1,342 \cdot 10^7$ Дж/кг. Масса стехиометрической смеси водорода и кислорода

$$M_{st} = m_p \beta n_0 (\mu_{H_2} + 0,5 \mu_{O_2}).$$

Полная масса смеси

$$M_{\Sigma} = m_p \beta n_0 \mu_{H_2} + m_p (1 - \beta) n_0 \mu_{air},$$

где $\mu_{air} = 0,79 \mu_{N_2} + 0,21 \mu_{O_2}$.

Удельная (на единицу полной массы) теплота сгорания водородовоздушной смеси

$$q_{eff} = q \frac{M_{st}}{M_{\Sigma}}.$$

Будем следовать полученным в [9] соотношениям между различными величинами в детонационной волне (ДВ) в политропном газе. Согласно [9] скорость ДВ

$$D = \left\{ \frac{\gamma_2 - 1}{2} [(\gamma_2 + 1) q_{eff} + (\gamma_2 + \gamma_1) c_{v1} T_1] \right\}^{1/2} + \left\{ \frac{\gamma_2 + 1}{2} [(\gamma_2 - 1) q_{eff} + (\gamma_2 - \gamma_1) c_{v1} T_1] \right\}^{1/2}. \quad (2)$$

Здесь $c_{v1} = \frac{P_1}{\rho_1 T_1 (\gamma_1 - 1)} = \frac{R}{\tilde{\mu}_1 (\gamma_1 - 1)}$, $R = 8,314 \frac{\text{Дж}}{\text{град} \cdot \text{моль}}$, $\tilde{\mu}$, кг/моль = $10^{-3} \cdot \mu$, г/моль,

$\tilde{\mu}_1 = 10^{-3} \cdot [(1 - \beta) \mu_{air} + \beta \mu_{H_2}]$.

Для нахождения γ_2 рассмотрим сгоревший газ, считая его гомогенной изотермической смесью воды и воздуха. Единица объема сгоревшей смеси состоит из n_2 молекул. Энергия единицы объема $E = P/(\gamma_2 - 1)$ представляет сумму компонентов

$$\frac{P}{\gamma_2 - 1} = \frac{n_2 k T}{\gamma_2 - 1} = \sum \frac{P_i}{\gamma_i - 1} = \sum \frac{n_2 \beta_i k T}{\gamma_i - 1},$$

откуда следует

$$\frac{1}{\gamma_2 - 1} = \sum \frac{\beta_i}{\gamma_i - 1}. \quad (3)$$

Исходим из реакции $2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}$. Для исходного числа частиц n_0 получим $n_{\text{H}_2\text{O}} = n_{\text{H}_2} = \beta n_0$ молекул воды и $n_{\text{air}} = n_0 - n_{\text{H}_2\text{O}} - n_{\text{H}_2} = n_0 - 2n_{\text{H}_2} = n_0(1 - 2\beta)$. Мольная доля воды

$$\beta_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{n_{\text{H}_2\text{O}}}{n_0 - n_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{\beta}{1 - \beta}, \quad (4)$$

мольная доля воздуха в продуктах горения

$$\beta_{\text{air}} = 1 - \frac{\beta}{1 - \beta} = \frac{1 - 2\beta}{1 - \beta}. \quad (5)$$

Постоянная адиабаты воздуха в продуктах горения по-прежнему равна $\gamma_{\text{air}} = 1,4$. Постоянную адиабаты воды находим, полагая, что температура достаточно велика для возбуждения колебательных степеней свободы. Тогда для трехатомной молекулы воды, являющейся нелинейной, согласно [10] находим $\gamma_{\text{H}_2\text{O}} = 7/6$. Отсюда и из формул (3)–(5) следует, что

$$\gamma_2 = \frac{3,5}{2,5 + \beta}. \quad (6)$$

Это позволяет найти скорость ДВ по формуле (2).

Согласно [9] давление за фронтом ДВ в точке Чепмена – Жуге (Ч-Ж)

$$P_{\text{Ч-Ж}} = \frac{D^2 + (\gamma_1 - 1)c_{v1}T_1}{(\gamma_2 + 1)(\gamma_1 - 1)c_{v1}T_1}. \quad (7)$$

Однако, согласно [9], непосредственно за ударной волной, являющейся передним фронтом сильной ДВ, соответствующей точке Ч-Ж, находится несгоревшая газовая смесь в состоянии, отличном от состояния в точке Ч-Ж. А именно, давление в ней, как следует из [9],

$$P_{\text{Sw}} = \frac{2D^2\rho_1 - (\gamma_1 - 1)P_1}{\gamma_1 + 1}. \quad (8)$$

4. Сравнение расчетно-теоретических результатов с измерениями

На рис. 2,а,б приведены расчетные трехмерные картины течения на два момента времени для опыта К132 (см. табл. 1), на рис. 2,в,г – двумерные картины течения в плоскости сечения посередине трубы на два момента времени для того же опыта. Рисунок дает ясное представление о динамике течения. Видно, что непосредственно за фронтом горения смесь не выгорает полностью, имеются невыгоревшие фрагменты, которые выгорают с течением времени. Для остальных опытов картины течения принципиально ничем не отличаются от показанных на рис. 2.

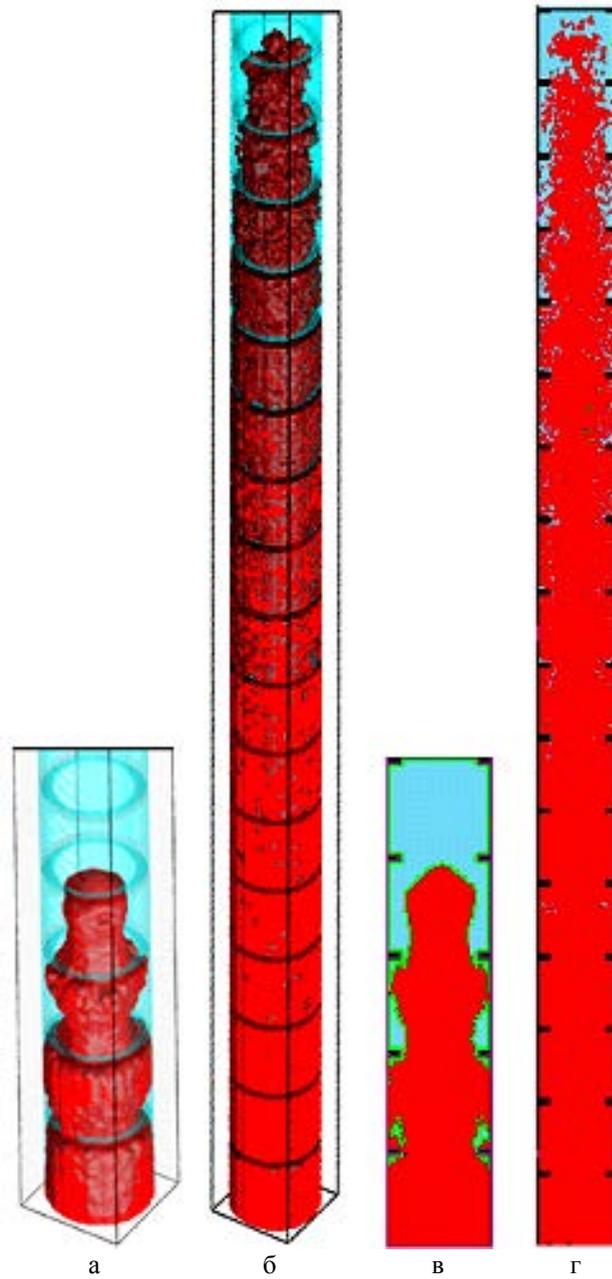


Рис. 2. Расчетные 3D и 2D картины течения для опыта K132: а – 3D на $t = 0,03$, б – 3D на $t = 0,1$, в – 2D на $t = 0,03$, г – 2D на $t = 0,1$

4.1. Сравнение максимальных значений давления и скорости

На рис. 3,б [4] показаны экспериментальные зависимости давления за фронтом ударной и детонационной волн от мольной доли водорода. Как видно, в [4] к точке Ч-Ж ошибочно отнесена величина $P_{\text{Ч-Ж}}$, на самом деле ей соответствует P_{SW} – давление непосредственно за фронтом

ударной волны. Заметим, что P_{SW} имеет характер кратковременного всплеска и наблюдается как в эксперименте (рис. 3,а), так и в расчетах авторов статьи (см. п. 4.3). В расчетах по FIRECON максимальные давления на оси трубы (кривая 1 на рис. 3,б) ближе к теоретической зависимости $P_{SW}(\beta)$.

Значение P_{AICC} в [4] (кривая 5 на рис. 3,б) как раз соответствует точке Чепмена – Жуге, практически совпадая с рассчитанным авторами по формулам [9] значением $P_{Ч-Ж}$. Другими словами, режим AICC** есть просто режим детонации в точке Ч-Ж. В расчетах же по FIRECON значению максимального давления на фронте горения соответствует как раз $P_{Ч-Ж}$.

Детонационный режим требует, чтобы размеры объема для горючей смеси достигали порядка размеров детонационной ячейки. Принято считать, что существует более слабый режим AICC, чем детонационный, позволяющий в ограниченном объеме (т. е. в объеме, много меньшем размеров детонационной ячейки) получить максимальное давление, достижимое в режиме дефлаграции. Скорость сгоревшей смеси относительно несгоревшей согласно [9]

$$v_s = \left\{ \frac{2}{\gamma_2 + 1} [(\gamma_2 - 1)q_{eff} + (\gamma_2 - \gamma_1)c_{v1}T_1] \right\}^{1/2}.$$

Согласно [4] она как раз соответствует запертому режиму, хотя расчет давления в этом режиме дает $P_{Ч-Ж}$. Это еще раз подтверждает, что запертый режим есть просто режим детонации в точке Чепмена – Жуге. В этом режиме при $\beta < 15\%$ наблюдается скорость ДВ, теоретическая зависимость которой от мольной доли водорода показана на рис. 3,в, как и зависимость $v_s(\beta)$. В целом расчеты скорости по FIRECON близки к экспериментальным, теоретические же кривые систематически ниже соответствующих кривых [4].

Экспериментальные точки для $\beta < 10\%$ соответствуют медленному горению (дефлаграции). Из рис. 3,в видно, что для опыта K15 ($\beta = 0,127$) расчет скорости по FIRECON, как и измерения, соответствует запертому режиму. Расчет давления по FIRECON для опыта K132 ($\beta = 10\%$) также соответствует запертому режиму, в то время как измерения дают меньшие значения давления и скорости, соответствующие дефлаграции (медленному горению). Это может быть связано с дополнительными факторами в экспериментах (излучение, влияние пограничного слоя), подавляющими горение, как вследствие снижения турбулентности, так и из-за уменьшения энергии за фронтом ударной волны. В расчетах авторов эти факторы не учитывались, поэтому возможно завышение параметров горения для малого содержания водорода в смеси.

В вариантах с $\beta > 15\%$ расчетные показатели, как и данные измерений, соответствуют режиму детонации.

В табл. 2 приведены максимальные значения скорости и давления, полученные на стадии установления в опытах [4] и расчетах.

** Adiabatic Isochoric Complete Combustion (AICC) – так называемый запертый (choking) режим [4].

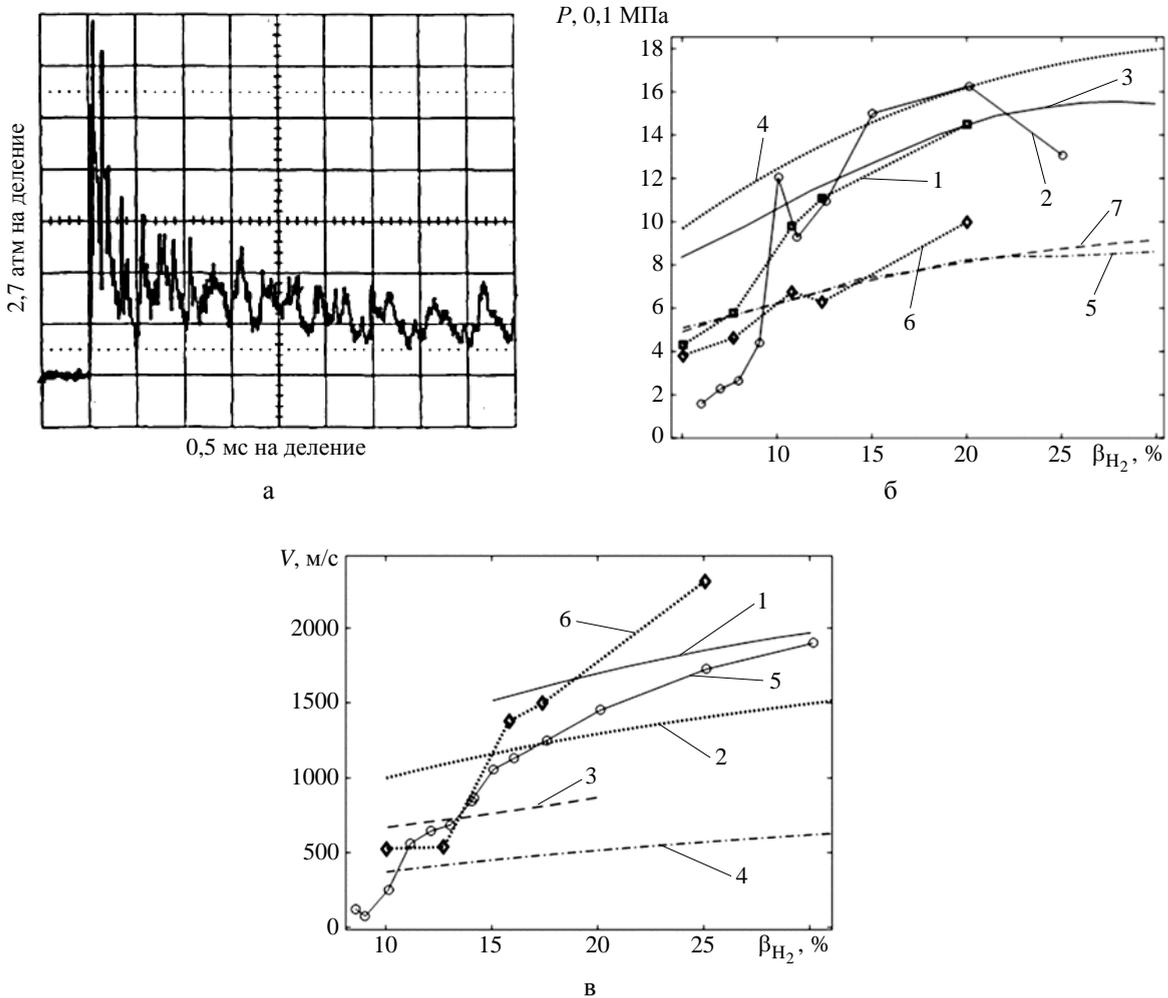


Рис. 3. Типичная зависимость давления от времени [3] в режиме детонации (а); зависимости максимального давления за фронтом ударной (1–4) и детонационной (5–7) волн (б): 1 – максимальное давление на оси трубы (расчет), 2 – эксперимент [4], 3 – $P_{\text{Ч-Ж}}$ [4], 4 – P_{SW} по [9], 5 – $P_{\text{АИСС}}$ по [4], 6 – максимальное давление на фронте горения $P_{\text{Ч-Ж}}$ (расчет), 7 – $P_{\text{Ч-Ж}}$ [9]; зависимости скорости ДВ и звуковой волны от мольной доли водорода (в): 1 – $V_{\text{Ч-Ж}}$ [3], 2 – $D_{\text{Ч-Ж}}$ [8], 3 – $V_{\text{АИСС}}$ [4], 4 – v_s (в) [9], 5 – опыты 4, 6 – расчет

Таблица 2

Расчетные и экспериментальные максимальные значения скорости и давления

Номер опыта	Содержание водорода, %	Скорость, м/с		Давление, атм		Режим горения	
		опыт	расчет	опыт	расчет	опыт	расчет
9	25,04	1730	2320	16,3	17,9	Детонация	Детонация
11	17,39	1248	1500	10,9	11,6	Детонация	Детонация
21	15,8	1116	1380	12	9,67	Детонация	Детонация
15	12,72	683	539	2,7	5,3	Закрытый режим	Закрытый режим
132	10,02	254	260–530		3,1–4,35	Дефлаграция	Закрытый режим

Примечание: начальная температура 300 К, начальное давление 1 атм.

4.2. Зависимости давления и скорости фронта пламени от времени и продольной координаты

На рис. 4 приведены зависимости скорости фронта пламени от продольной координаты, измеренные в [4] и полученные авторами в расчетах.

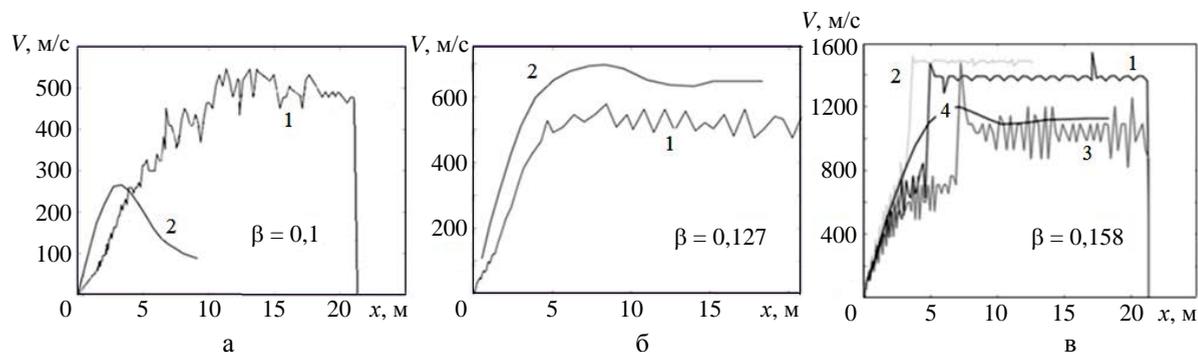


Рис. 4. Зависимости скорости фронта пламени от продольной координаты: а – опыт К132 (1 – расчет, 2 – эксперимент); б – опыт К15 (1 – расчет, 2 – эксперимент); в – опыт К21 (1 – сетка N , 2 – сетка $2N$, 3 – сетка $N/2$, 4 – эксперимент)

Из рис. 4 видно, что расчеты наиболее близко воспроизводят начальную стадию выхода на стационарный режим. Следует отметить, что в экспериментах имелись дополнительные факторы, снижающие скорость горения, не учитываемые в расчетах: потери энергии на излучение и подавление турбулентности вблизи твердых поверхностей. При $\beta = 0,1$ (рис. 4,а) реализуется режим наиболее слабого и неустойчивого горения; расчет поздней стадии больше всего отличается от измерений. Рис. 4,б демонстрирует, что огрубление сетки до $N/2$ ухудшает согласие с опытом на начальной стадии, на более подробной сетке $2N$ согласие улучшается. На стационарной стадии в опыте К21 скорость горения в расчетах на достаточно подробной сетке выше из-за неучета отмеченных в экспериментах факторов. Однако расчет на грубой сетке приводит к некоторому занижению скорости горения из-за подавления турбулентности схемной вязкостью. Видимо, расчет опыта К15 (рис. 4,б) также выполнен на недостаточно подробной сетке.

На рис. 5 приведены зависимости скорости фронта пламени от времени.

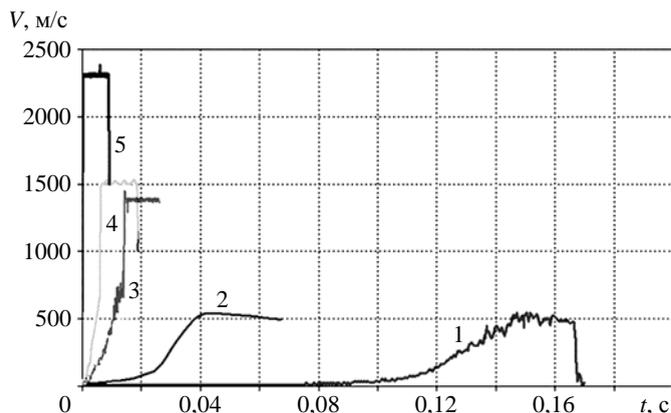


Рис. 5. Расчетные зависимости скорости фронта пламени от времени: 1 – опыт К132 ($\beta = 0,1$); 2 – опыт К15 ($\beta = 0,1272$); 3 – опыт К21 ($\beta = 0,158$); 4 – опыт К11 ($\beta = 0,1739$); 5 – опыт К9 ($\beta = 0,2504$)

На рис. 6,а приведены зависимости максимального давления для опыта К21 ($\beta = 0,158$) от координаты фронта пламени на разных сетках. Видно, что вариация счетной сетки в целом незначительно сказывается на результатах счета. При измельчении сетки лишь увеличивается пиковое значение максимального давления, поэтому далее приводятся результаты расчетов на средней сетке N . На рис. 6,б–д приведены расчетные зависимости давления за фронтом пламени от координаты фронта пламени для других опытов. Видно, что выход на плато в расчете $\beta = 0,1$ не происходит, хотя скорость горения выходит на плато (см. рис. 4,а). Поскольку горение медленное, ударная волна быстро достигает стенки, и давление перед фронтом растет, что вызывает рост давления на фронте и за ним. В то же время в расчете с $\beta = 0,127$ достигается выход на плато. В расчете опыта К11 достигается режим детонации. Следовательно, максимальное давление достигается на фронте ударной волны, прилегающем к зоне горения, а значит, остается постоянным вплоть до конца трубы. В расчете опыта К9 режим детонации достигается еще быстрее, поэтому давление остается постоянным вплоть до конца трубы.

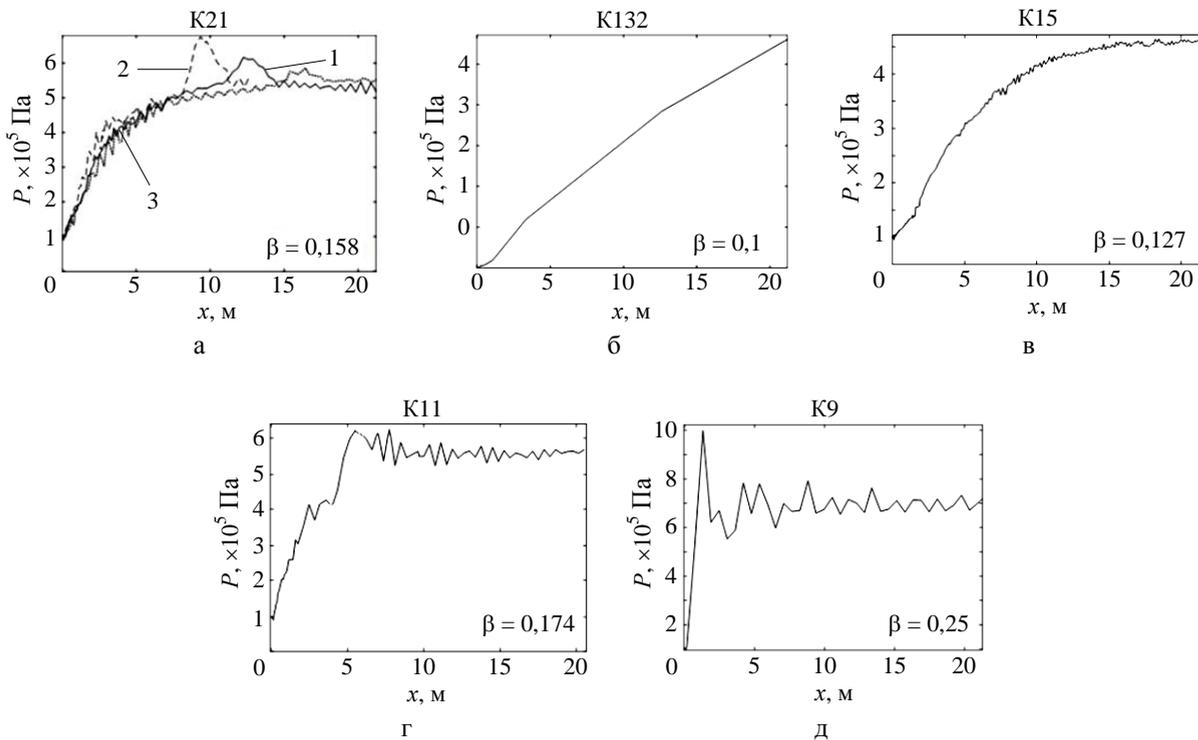


Рис. 6. Расчетные зависимости максимального давления от координаты фронта пламени: а – опыт К21 с вариацией счетной сетки (1 – N , 2 – $2N$, 3 – $N/2$); б–д – опыты К132, К15, К11, К9 на сетке N

Подчеркнем, что на рис. 6 приведены максимальные значения давления именно на фронте ДВ, т. е. в точке, где появляется сгоревшее вещество. В то же время давление перед фронтом превышает давление на фронте, как это отмечено в разд. 3 и будет показано далее.

4.3. Профили давления и продольной компоненты скорости

На рис. 7 показаны профили давления вдоль оси трубы на моменты выхода скорости горения на плато.

В расчетах опытов К132 и К15 имеет место слабое горение, давление ниже значения, соответствующего детонационному режиму (см. рис. 3,а). Поэтому, как видно из рис. 7, перед фронтом горения наблюдается ударная волна с небольшим повышением давления на фронте горения.

В расчетах опытов К21, К11, К9 прорисовывается скачок на фронте ударной волны, за которым следует «полочка», соответствующая ДВ, т. е. находящаяся за фронтом горения.

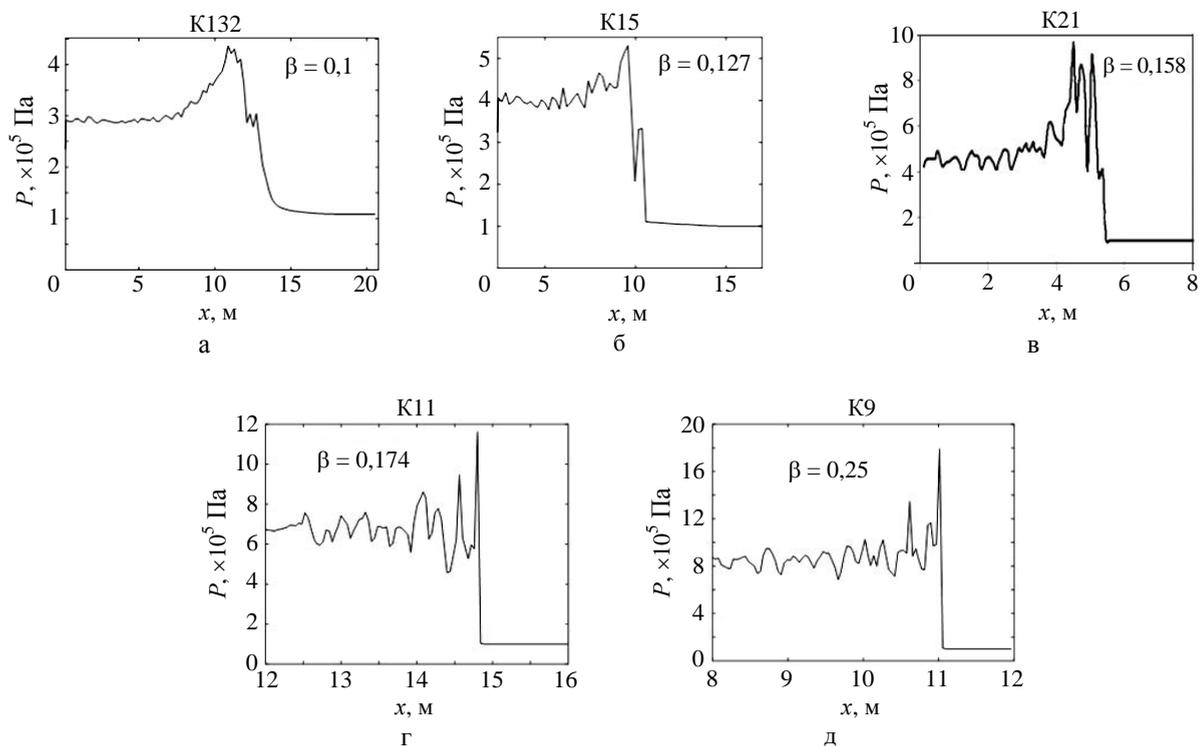


Рис. 7. Расчетное давление вдоль оси трубы: а – опыт К132, $t = 0,15$; б – опыт К15, $t = 0,05$; в – опыт К21, $t = 0,015$; г – опыт К11, $t = 0,01$; д – опыт К9, $t = 0,005$

На рис. 8 показаны рассмотренные в работе [9] случаи распространения ДВ вдоль трубы: от закрытого конца трубы (рис. 8,а) и от открытого конца трубы (рис. 8,б).

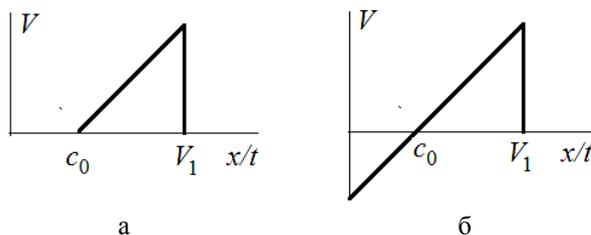


Рис. 8. Профили продольной компоненты скорости вдоль трубы [9]

На рис. 9 приведены зависимости продольной компоненты скорости от расстояния вдоль оси трубы. Видно, что в случае распространения ДВ от закрытого конца трубы профиль скорости в действительности не соответствует рис. 8 [9], а представляет некоторую комбинацию предложенных в [8] режимов: вначале за фронтом достигается нулевое значение скорости, затем продолжается ее снижение до некоторой отрицательной величины, как в случае открытого конца трубы (рис. 9,б), а затем она возрастает, достигая нулевого значения у закрытого конца трубы. Такой характер течения присущ всем расчетам.

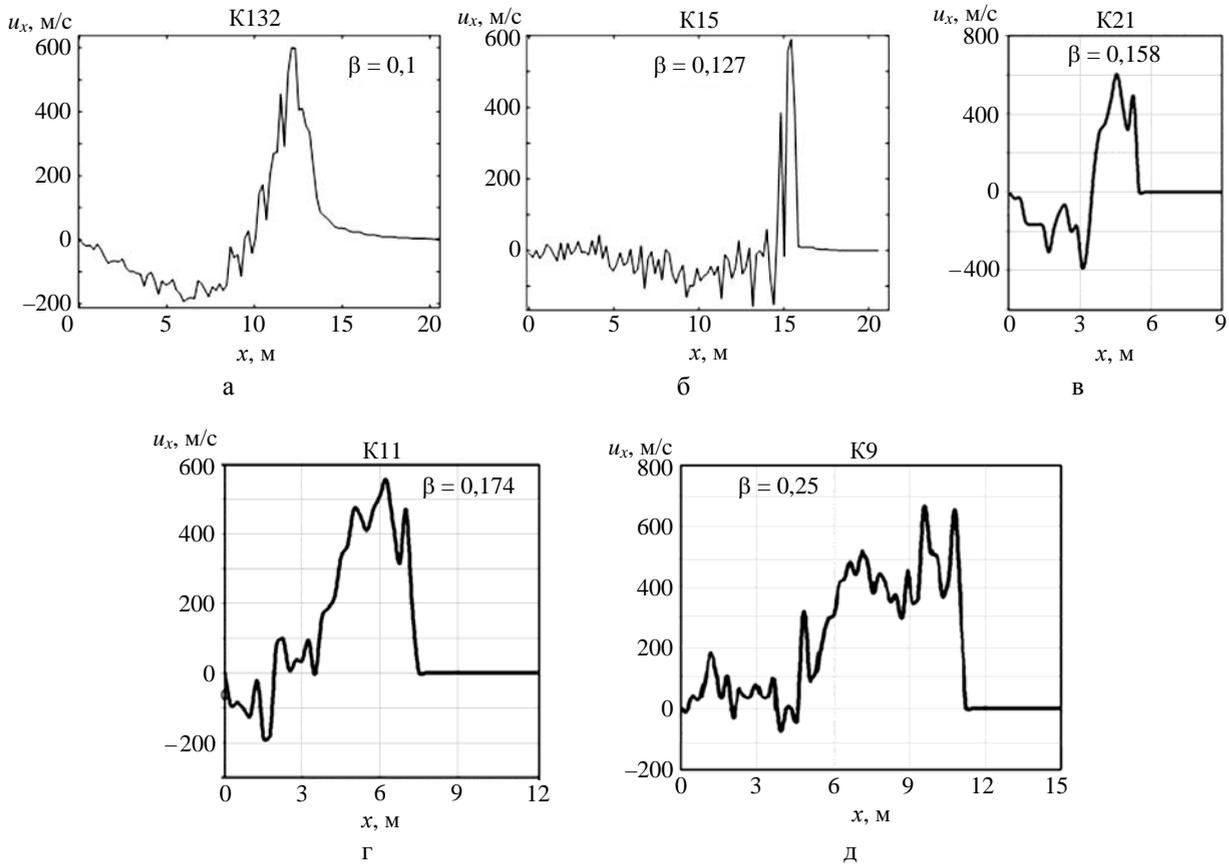


Рис. 9. Продольная компонента скорости вдоль оси трубы в расчетах: а – опыт K132, $t = 0,15$; б – опыт K15, $t = 0,06$; в – опыт K21, $t = 0,015$; г – опыт K11, $t = 0,01$; д – опыт K9, $t = 0,005$

4.4. Размеры детонационной ячейки

В задаче с $\beta = 0,1$ (вариант 1, см. табл. 1) существует только первый режим – медленное горение, третий режим – детонация – не достигается. Этому режиму соответствуют не только $\sigma > \sigma_{cr}$, но и значение отношения внутреннего диаметра d препятствия к размеру детонационной ячейки λ_d , меньшее критического: $d/\lambda_d < 3,75$. То же относится к варианту 2 ($\beta = 0,127$).

В задаче с $\beta = 0,158$ (вариант 3) вначале (при $t \lesssim 0,01$) существует только первый режим, но уже при $t = 0,015$ значение d/λ_d составляет от 28 до 56, т. е. намного больше критического, – явно детонационный режим.

В задаче с $\beta = 0,1739$ (вариант б) вначале (при $t = 0,006$) существует только первый режим, но уже при $t = 0,0065$ значение d/λ_d составляет от 8,7 до 66, т. е. намного больше критической величины. Более подробное рассмотрение этой задачи показывает, что от $t = 0,0065$ до $t = 0,012$ интервал значений d/λ_d остается приблизительно постоянным: от 8,2–9 до 60–70. Так же ведет себя скорость горения в качестве функции времени (см. рис. 8,б): скачком возрастает при $t \gtrsim 0,6$ и затем остается приблизительно постоянной. Таков же характер поведения рассмотренных величин в других вариантах, в которых достигается режим детонации ($\beta = 0,158$ и $\beta = 0,2504$, см. рис. 5).

В работе [4] получен критерий $d/\lambda_d \gtrsim 1$ для перехода от горения к детонации. Это согласуется с результатами, приведенными в [11] (согласно [11] для поддержания уже созданного детонационного режима требуется менее жесткий критерий $d/\lambda_d \gtrsim 1/\pi$), что не противоречит результатам авторов данной статьи.

Заключение

Результаты расчетов по коду FIRECON для опыта K15 ($\beta = 12,7\%$), как и результаты измерений, соответствуют запертому (choking) режиму. Расчет по FIRECON для опыта K132 с $\beta = 10\%$ также соответствует запертому режиму, тогда как измерения дают меньшие значения давления и скорости, соответствующие режиму дефлаграции. Это может быть связано с наличием в экспериментах дополнительных факторов (излучение, влияние пограничного слоя), подавляющих горение, как вследствие подавления турбулентности, так и из-за уменьшения энергии за фронтом ударной волны. В расчетах авторов эти факторы не учитываются, поэтому возможно завышение параметров горения при малом содержании водорода в смеси.

В опытах K21, K11, K9 с $\beta > 15\%$ результаты расчетов и измерений соответствуют режиму детонации. Рассчитанные профили давления и скорости в установившихся режимах горения указывают на наличие ударной волны перед фронтом ДВ. Характеристики ударной и детонационной волн согласуются с известными теоретическими результатами [9].

Список литературы

1. Синькова О. Г., Стаценко В. П., Янилкин Ю. В. Прямое численное моделирование перехода к детонации горения водородовоздушной смеси в трубе с препятствиями // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теор. и прикл. физика. 2015. Вып. 2. С. 3–20.
2. Yanilkin Yu. V., Statsenko V. P., Tarasov V. I. et al. The Firecon code for numerical simulations of 3D NPP hydrogen mitigation problems // Meeting on the ISTC Project N 436-97. Physical model and code development for deflagration-to-detonation transition and detonation of hydrogen containing mixtures. Cologne, May 17–19, 2000.
3. Янилкин Ю. В., Беляев С. П., Бондаренко Ю. А. и др. Эйлеровы численные методики ЭГАК и ТРЭЖ для моделирования многомерных течений многокомпонентной среды // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2008. Вып. 12. С. 54–65.
4. Ciccarelly G., Voccio J. L., Ginsberg T. et al. The effect of initial temperature on flame acceleration and deflagration-to-detonation transition phenomenon. NUREG/CR-6509, BNL-NUREG-52515, May 1998.

5. Баум Ф. А., Станюкович К. П., Шехтер Б. И. Физика взрыва. – М.: Гос. изд-во. физ.-мат. лит-ры, 1959.
6. Рабинович В. А., Хавин З. Я. Краткий химический справочник. – Л.: Химия, 1978.
7. Баум Ф. А., Орленко Л. П., Станюкович К. П. и др. Физика взрыва. – М.: Наука, 1975.
8. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т. 1 / Под ред. В. П. Глушко и др. – М.: Наука, 1978.
9. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. – М.: Наука, 1986.
10. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. – М.: Наука, 1966.
11. Lee H. S. J. The Detonation phenomenon. – New York: Cambridge University Press, 2008.

Numerical Analysis of Deflagration-to-Detonation Transition in Hydrogen-Air Mixtures in HTCF Experiments

O. G. Sin'kova, V. P. Statsenko, Yu. V. Yanilkin

3D direct numerical simulations of turbulent combustion development in hydrogen-air mixtures have been carried out using the code FIRECON. The flow evolution results in the deflagration-to-detonation transition when the flame front moves along a tube with obstacles. The numerical results are compared with experimental data obtained at the HTCF facility.