

## **Влияние выбора моделей горения и механизмов реакций на достоверность прогнозирования перехода горения в детонацию**

*Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ»*

Проведен сравнительный анализ моделей горения и механизмов реакций горения метана. Разработана математическая модель для расчета процесса горения в замкнутой цилиндрической камере постоянного объема с учетом перехода процесса сгорания топливной смеси из дефлаграционного в детонационный режим. Показано, что применение модели конечной скорости химической реакции с помощью интегрального механизма окисления метана, неприменимо для расчета перехода горения в детонацию. Использование же модели скорости горения с применением подробного механизма окисления метана позволило наиболее точно описать явление перехода сгорания в детонацию, что может быть использовано для расчета режимов термоимпульсной обработки.

**Ключевые слова:** модель конечной скорости химической реакции, модель скорости горения, подробный механизм окисления, интегральный механизм окисления, детонация, переход горения в детонацию, математическое моделирование.

### **1. Введение**

Количественное прогнозирование перехода горения в детонацию (ПГД) при сгорании топливных газовых смесей является одной из важных проблем современной теории горения и детонации. Предсказание появления ПГД имеет важное практическое применение, от обеспечения безопасности применения газообразного топлива до управляемого использования детонации, так как – это наиболее эффективный способ прямого сжигания горючего.

Одной из главных задач при расчете высокоскоростных реагирующих потоков при переходе из дефлаграционного в детонационный режим сгорания является выбор правильной модели горения, а также необходимость применения таких механизмов химических реакций, которые представляют собой достаточно подробные, для воспроизведения экспериментальных наблюдений в широком диапазоне условий, но и максимально простые, для обеспечения численной эффективности. Модели окисления для метана, как правило, состоят из 55-250 элементарных реакций, и, что более важно, они включают в себя от 28 до 50 и более реагентов. Вычислительные затраты, связанные с данным механизмом реакций в сочетании с существующими двух- или трехмерными CFD кодами в первую очередь зависят от количества реагентов, использованных в этих моделях.

Существует интегральный механизм окисления метана. Этот механизм сокращает количество элементарных реакций, объединяя их в одну глобальную. Несмотря на то, что такой механизм позволяет достаточно точно описывать такие свойства, как предел воспламеняемости, температура горения, состав продуктов горения, модель не позволяет точно описать химическую структуру пламени. При моделировании детонации в некоторых случаях это может привести к неправильному определению перехода горения в детонационный режим.

Так как применение и интегрального, и подробного кинетического механизма горения топливных смесей имеет место при прогнозировании перехода горе-

ния в детонацию, то целью настоящей работы является проведение сравнительного анализа моделей и механизмов реакции горения в применении к расчету ПГД при горении метановоздушной смеси в замкнутой камере сгорания оборудования для термоимпульсной обработки.

## 2. Описание решаемой задачи и используемых математических моделей

Объектом исследования являются процессы горения и детонации в цилиндрической камере сгорания высотой 441 мм и диаметром 280 мм с поджогом сверху камеры.

При решении задачи рассматривалось сгорание метановоздушной смеси. Считалось, что в момент перед зажиганием в камере находится неподвижная гомотогенная смесь с массовой концентрацией топлива в соответствии со стехиометрическим составом: на 1 кг метана – 17,2 кг воздуха.

В ходе численного моделирования с помощью инструментов ANSYS CFX изучали влияние выбора кинетического механизма реакции и модели горения на достоверность прогнозирования перехода сгорания топливной смеси из дефлаграционного в детонационный режим.

### 2.1. Модель скорости горения

Горение топливных смесей может быть описано с помощью Flamelet-моделей, которые основываются на расчете прогресса реакции. В частности, применяется «модель скорости горения», которая разработана для расчета сгорания предварительно перемешанных смесей. При горении углеводородного топлива текущее содержание  $CO_2$  может быть подходящей переменной для расчета прогресса реакции горения, так как значение монотонно возрастает на протяжении горения топливной смеси [1]. Тем не менее и другие характеристики пламени, такие, как содержание  $H_2O$  или  $T$ , также могут быть использованы при расчете прогресса реакции горения. В данном случае переменная прогресса реакции "с" представляется как

$$c = \frac{Y_{CO_2}}{(Y_{CO_2})_{max}}, \quad (1)$$

где  $(Y_{CO_2})_{max}$  – это максимальное содержание  $CO_2$ , которое имеет место в случае полного сгорания топливной смеси ( $c = 1$ ).

Предполагается, что в турбулентном потоке переменная "с" имеет бимодальное распределение. В любой данный момент времени и положения в пространстве, смесь считается либо полностью сгоревшей, либо полностью «свежей». Это предположение оправдано лишь в том случае, если химическая реакция быстрее по сравнению с интегральной временной шкалой турбулентности в потоке.

Тогда, усредненное значение прогресса реакции "с" является вероятностью того, что текущее состояние смеси соответствует полностью сгоревшему. Средний состав реагентов топливной смеси рассчитывают по формуле

$$\tilde{Y}_i = (1 - \tilde{c}) \tilde{Y}_{i, \text{свеж}} + \tilde{c} \tilde{Y}_{i, \text{сгор}}. \quad (2)$$

При этом переменную прогресса реакции вычисляют путем решения уравнения

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{c})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{c})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \bar{\rho}D + \frac{\mu_t}{\sigma_c} \right) \frac{\partial\tilde{c}}{\partial x_j} \right] + \bar{\omega}_c, \quad (3)$$

$$\bar{\omega}_c = \bar{S}_c - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}D) \frac{\partial\tilde{c}}{\partial x_j}, \quad (4)$$

$$\bar{S}_c = \bar{\rho}_u S_T |\nabla\tilde{c}|,$$

где  $\rho$  – плотность смеси;

$\rho_u$  – плотность несгоревшей смеси;

$u$  – скорость смеси;

$x_j$  – физическая координата в направлении  $j$ ;

$D$  – коэффициент диффузии;

$\sigma_c$  – турбулентное число Шмидта;

$\mu_t$  – турбулентная вязкость;

$S_T$  – турбулентная скорость горения.

Уравнение баланса реагентов при горении предварительно перемешанной топливной смеси будет иметь вид

$$\rho \frac{\partial(Y_j)}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial(Y_j)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D \frac{\partial Y_j}{\partial x_i} \right) = \rho \sum_{n=1}^N \nu_{jn} \omega_n, \quad (5)$$

где,  $Y_j$  – содержание реагента  $j$ ;

$u_i$  – скорость смеси в направлении  $i$ ;

$\nu_{jn}$  – стехиометрический коэффициент реагента  $j$  в реакции  $n$ ;

$N$  – суммарное количество реакций;

$\omega_n$  – скорость реакции  $n$ .

Главным преимуществом Flamelet-моделей является то, что даже если в расчет включена подробная информация о молекулярных процессах переноса и кинетике элементарных реакций, не требуется высокая точность численного решения и мелкий масштаб по времени (кроме случая расчета высокоскоростных реагирующих потоков). Это позволяет избежать сильной нелинейности колебания параметров течения и делает численную модель очень надежной.

При возникновении детонации в уравнение прогресса реакции (3) добавляются дополнительный источниковый член. Величина этой составляющей определяется как скорость реакции при детонации и является реакцией первого порядка, константы скорости которой определяются с помощью температурных зависимостей Аррениуса

$$S_{c,dem} = \bar{\rho}(1 - \tilde{c}) \cdot A_{dem} \cdot \exp\left(-\frac{E_{A,dem}}{RT}\right) \cdot \delta(\tilde{R} - 1), \quad (6)$$

где  $\tilde{R}$  – нормализованная концентрация свободных радикалов;

$A_{dem}$  – предэкспоненциальный фактор;

$E_{A,dem}$  – энергия активации детонации.

Для реализации описанной выше модели с учетом сложности процессов, происходящих при переходе из горения в детонацию, необходимо использовать подробный кинетический механизм реакции горения. Рассмотрим его более детально.

Механизм горения метана, который использовали в данной работе в рамках применения «модели скорости горения», основывается на полном кинетическом механизме горения, который состоит из 325 элементарных реакций и включает в себя 53 реагента. Далее полный механизм подвергался процессу подробного сокращения. Подробное сокращение – это систематический метод сокращения большой цепочки элементарных реакций с сохранением при этом точности прогнозирования требуемых характеристик горения. Обычно кинетический механизм разрабатывают для прогнозирования ряда характеристик горения (возгорание, скорость горения, состав, вредные выбросы и т.д.), и многие из них неважны для конкретного применения механизма реакции. Для моделирования детонации, например, реагенты, которые не вносят большой вклад в выход энергии или в возгорание топлива, не представляют особый интерес. Для тестирования влияние различных реагентов и элементарных реакций было разработано два критерия [3]:

$$|K_j| < \varepsilon_k |K_{\text{этл}}|, \quad (7)$$

$$|K_j \Delta H_j| < \varepsilon_Q \dot{Q}_{\text{max}}, \quad (8)$$

где  $K_j$  – скорость реакции  $j$ ;

$K_{\text{этл}}$  – эталонная скорость реакции (обычно это реакция с предельной скоростью, в данном случае это реакция  $\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$ );

$\Delta H_j$  – энтальпия реакции  $j$ ;

$\dot{Q}_{\text{max}}$  – максимальный выход энергии за единицу времени среди всех элементарных реакций;

$\varepsilon_k$  и  $\varepsilon_Q$  – величины значительно меньше единицы.

Первое неравенство проверяет вклад каждой элементарной реакции в разветвление общего механизма, второе – в выделение тепла. Реакции, скорости которых (с учетом обратных реакций) удовлетворяют неравенства (7) и (8), удаляют из механизма. Была проведена серия расчетов и экспериментов [3]. В результате этого было показано, что полный механизм реакции можно сократить до подробного механизма, состоящего из 52 элементарных реакций, включающих в себя 19 реагентов, с сохранением требуемой точности. Список элементарных реакций для подробного механизма горения метана приведен в таблице.

Подробный механизм реакции горения метан-воздух

1	$\text{CH}_3 + \text{H} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CH}_4 + \text{M}$	15	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{O}$
2	$\text{CH}_3 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_2 + \text{H}_2\text{O}$	16	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}_2$
3	$\text{CH}_3 + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_2 + \text{H}_2$	17	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$
4	$\text{CH}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH} + \text{H}_2$	18	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$
5	$\text{CH}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	19	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{OH}$
6	$\text{CH}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH} + \text{H}_2\text{O}$	20	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$
7	$\text{CH} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{O}$	21	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2$
8	$\text{CH} + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}$	22	$\text{CH}_2\text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H} + \text{M}$
9	$\text{CH} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}$	23	$\text{CH}_2\text{O} + \text{O} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{OH}$
10	$\text{CH} + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{CO}$	24	$\text{HCO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$
11	$\text{CH}_2 + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{CO}$	25	$\text{HCO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H} + \text{CO} + \text{M}$
12	$\text{CH}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H} + \text{H}$	26	$\text{HCO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2$
13	$\text{CH}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2$	27	$\text{HCO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$
14	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H} + \text{H}$	28	$\text{HCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{CO}$

Продолжение таблицы

29	$\text{CO} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{M}$	41	$2\text{OH} \rightleftharpoons \text{O} + \text{H}_2\text{O}$
30	$\text{CO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$	42	$\text{H} + \text{H} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{M}$
31	$\text{CO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{O}$	43	$\text{H} + \text{H} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{H}_2$
32	$\text{HO}_2 + \text{CO} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{OH}$	44	$\text{H} + \text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{H}_2\text{O}$
33	$\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{OH}$	45	$\text{H} + \text{H} + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{CO}_2$
34	$\text{OH} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	46	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{M}$
35	$\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$	47	$\text{H} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{M}$
36	$\text{O} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{H}$	48	$\text{H} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$
37	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$	49	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$
38	$\text{OH} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	50	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{OH} + \text{M}$
39	$\text{H} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons 2\text{OH}$	51	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{H}_2$
40	$\text{O} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{OH}$	52	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$

## 2.2. Модель конечной скорости химической реакции

В случае применения модели конечной скорости химической реакции последняя описывается как совокупность  $K$  элементарных реакций с количеством вовлеченных компонентов  $N_c$  [4]:

$$[ \sum_{I=A,B,C,\dots}^{N_c} v_{ki}^{\bullet} I \rightleftharpoons \sum_{I=A,B,C,\dots}^{N_c} v_{ki}^{\bullet\bullet} I ], \quad (9)$$

где  $v_{ki}$  – стехиометрический коэффициент для компонента  $I$  в реакции  $k$ .

Величину выделения/поглощения тепла  $Q_{HI}$  для компоненты  $I$  вычисляют как сумму произведения для всех элементарных реакций с ее участием:

$$Q_{HI} = W_I \sum_{k=1}^K (v_{ki}^{\bullet\bullet} - v_{ki}^{\bullet}) R_k, \quad (10)$$

где  $R_k$  – скорость развития элементарной химической реакции  $k$ .

Использованная модель предполагает, что скорость элементарной реакции  $k$  может быть отрицательной, если определена обратная реакция. Поэтому величина  $R_k$  вычисляют как:

$$R_k = ( F_k \prod_{I=A,B,C,\dots}^{N_c} [I]^{r_{ki}^{\bullet}} - B_k \prod_{I=A,B,C,\dots}^{N_c} [I]^{r_{ki}^{\bullet\bullet}} ), \quad (11)$$

где  $[I]$  – молярная концентрация компонента  $I$ ;

$F_k, B_k$  – константы прямой и обратных реакций соответственно;

$r$  – доля компонента  $I$ , принимающая участие в элементарной реакции  $k$ .

Для определения констант прямых и обратных реакций используют температурные зависимости Аррениуса:

$$F_k = A_{k1} T^{\beta_{k1}} \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right), \quad (12)$$

$$B_k = A_{k2} T^{\beta_{k2}} \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right), \quad (13)$$

где  $A_k, \beta_k$  – эмпирические коэффициенты;

$E_k$  – энергия активации.

Нередко использование подробного механизма реакций нецелесообразно в применении главным образом из-за больших вычислительных затрат. В этом в рамках данной работы для случая применения модели конечной скорости химической реакции используют интегральный механизм реакции горения. При этом все элементарные реакции, показанные в таблице сводятся в одну, глобальную:



### 3. Численное исследование явления перехода горения в детонацию и анализ результатов моделирования

Как указывалось выше, рассмотрено горение метановоздушной смеси стехиометрического состава в камере сгорания высотой 441 мм и диаметром 280 мм (рис. 1) с начальным давлением 1,25 МПа. Поджог осуществлялся вверху камеры.

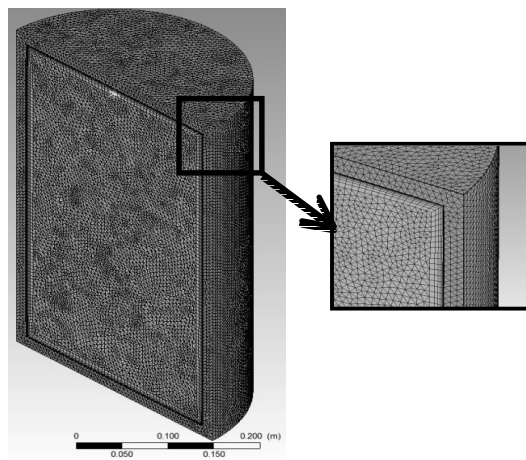


Рис. 1. Расчетная сетка конечных элементов

#### 3.1 Моделирование на основе модели конечной скорости химической реакции с применением интегрального механизма окисления метана

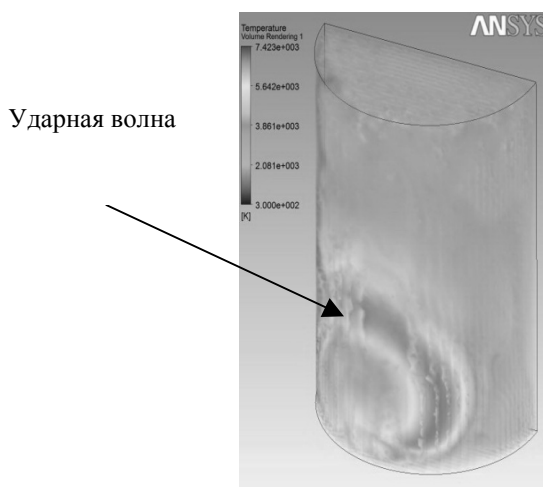


Рис. 2. Детонация метановоздушной смеси. Начальное давление в камере – 1,25 МПа

При моделировании горения исследовали распространение фронта пламени и температурный режим в камере сгорания.

Анализ результатов моделирования показывает, что уже с начальных моментов пламя начинает интенсивно турбулизироваться, что сказывается на существенном завихрении поверхности фронта горения и увеличении площади его поверхности. При переходе к детонационному режиму сгорания наблюдалось возникновение областей с повышенной температурой (с 2000 до 7000К, см. рис. 2). Остав-

шаяся часть топливной смеси сгорала в детонационном режиме с резким увеличением давления и скорости горения.

В ходе моделирования определяли значение давления в камере сгорания. График изменения давления по времени при сгорании метановоздушной смеси с  $P_0 = 1,25$  МПа показан на рис.3.

По результатам численного эксперимента следует отметить, что при описании горения с помощью модели конечной скорости химической реакции с применением интегрального механизма окисления метана, прогнозирование явления перехода сгорания в детонационный режим весьма затруднено и является очень неточным.

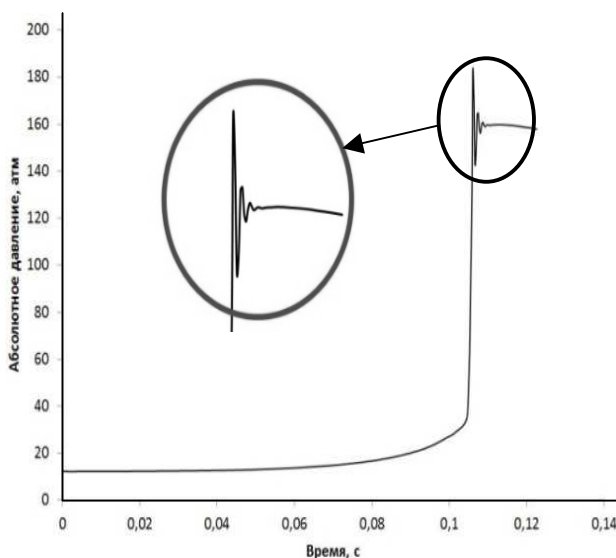


Рис. 3. Изменение давления по времени при сгорании метановоздушной смеси

В момент перехода в детонацию наблюдается существенный заброс температуры во фронте горения и достигает более 7000 К, что превышает реальное значение на 3500 ... 4000 К. Это привело к тому, что после затухания ударных волн средняя температура в камере составила 3550 К, что на 800 К больше расчетных значений [5]. При учете высоких скоростей горения при детонации это, несомненно, вызовет значительное повышение расчетных значений тепловых потоков, температуры, вязкости продуктов горения, что приведет к неправильному назначению режимов термоимпульсной обработки.

Таким образом, упрощенный механизм реакции в рамках использования модели конечной скорости химической реакции применяют для очень узкого диапазона параметров и зачастую его не используют для расчета высокоскоростных реагирующих потоков, возникающих при детонации.

### 3.2. Моделирование на основе модели скорости горения с применением подробного механизма окисления метана

В данном случае при моделировании оценивали также температурный режим в камере сгорания и контролировали давление.

Горение до момента перехода в детонацию носит такой же характер, как и в предыдущем случае. Существенное отличие наблюдается именно в момент ПГД. Применение подробного механизма окисления метана позволило комплексно описывать химическую структуру пламени. В процессе сгорания перед фронтом

пламени вследствие расширения продуктов сгорания несгоревшая рабочая смесь сжимается, и ее температура повышается. В результате повышения температуры и давления несгоревшей части рабочей смеси в ней возникают химические реакции окисления молекул топлива и образуются перекисные соединения. При достаточно высоких давлениях и температуре эти соединения воспламеняются еще до того, как к этой части рабочей смеси приблизится фронт пламени (рис. 4).

Начавшийся процесс сгорания распространяется с весьма высокой скоростью на соседние слои рабочей смеси, где также произошли предварительные реакции окисления.

Установлено, что детонационное сгорание, как правило, возникает в зоне камеры сгорания, наиболее удаленной от свечи зажигания, где рабочая смесь сгорает в последнюю очередь и наиболее подвержена сжатию газами, образовавшимися от сгоревшего топлива, и воздействию высоких температур. В результате такого развития процесса сгорания возникают ударные волны, которые распространяются с большой скоростью по всему объему камеры сгорания, т.е. происходит детонация топливно-воздушной смеси (рис. 5).

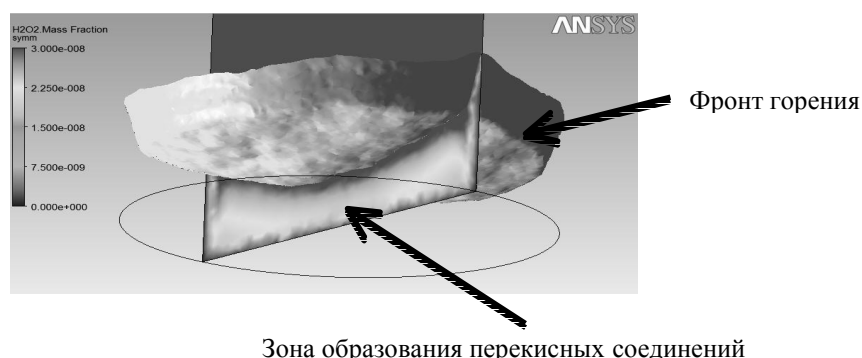


Рис. 4. Образование перекисных соединений в несгоревшей части смеси в момент перед детонацией

Распространение детонационной волны происходит со скоростью 2000 ... 2300 м/сек. Кроме того, применение подробного механизма окисления метана позволило учитывать такое явление как «эффект Махе», что невозможно при использовании глобального механизма горения.

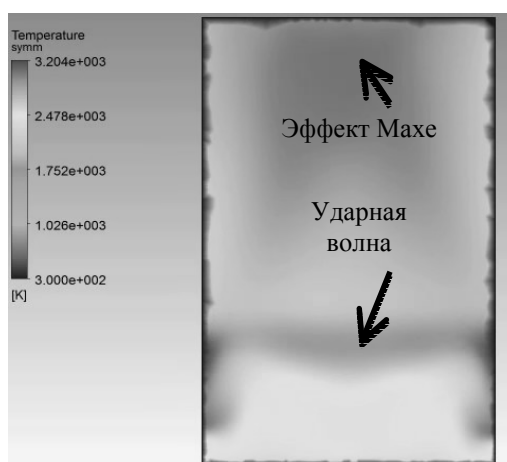


Рис. 5. Детонации метановоздушной смеси. Начальное давление в камере – 1,25 МПа



Так же, как и для случая моделирования на основе модели конечной скорости химической реакции с применением интегрального механизма окисления метана, определяли значение давления в камере сгорания. График изменение давления по времени при сгорании метановоздушной смеси с  $P_0 = 1,25$  МПа показан на рис. 3.

Результаты моделирования подтверждают пригодность модели скорости горения с применением подробного механизма окисления метана для расчета перехода сгорания топливной смеси в детонационный режим. Подтверждением этому является адекватный температурный режим в камере сгорания, а следовательно, и все термодинамические параметры газовой смеси.

Все это позволит точно оценивать тепловые потоки, время затухания ударных волн после детонации и прочие параметры и, следовательно, назначать правильные режимы для термоимпульсной очистки.

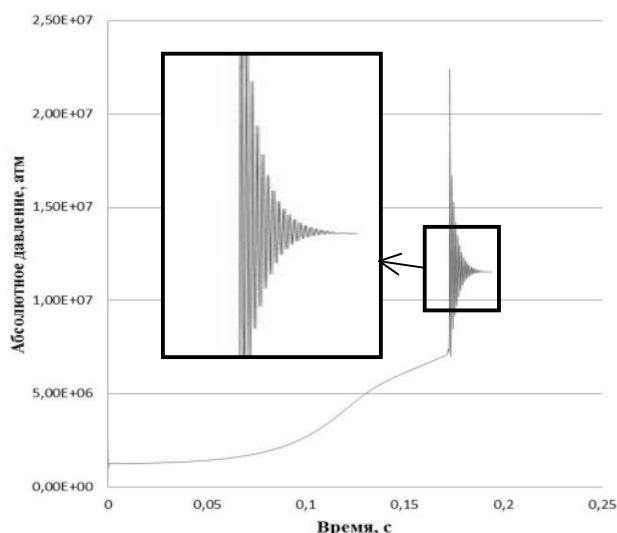


Рис. 3. Изменение давления по времени при сгорании метановоздушной смеси

## Выводы

1. Показано, что использование модели конечной скорости химической реакции с применением интегрального механизма окисления метана неприменимо для расчета высокоскоростных реагирующих потоков, возникающих при детонации, так как приводит к большим численным погрешностям.

2. Использование модели скорости горения с применением подробного механизма окисления метана наиболее точно описывает явление перехода сгорания в детонацию. Разработанная математическая модель с высокой степенью достоверности может быть использована для расчета режимов термоимпульсной обработки.

## Список литературы

1. Mohsen, M.M. A Flamelet Model for Premixed Methane-Air Flames [Текст] / Abou-Ellail, Karam R. Beshayb, Mohy S. Mansour // Combustion Science and Technology Vol.153: 1, 223 – 245 -р.

2. Варнатц, Ю. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / пер. с англ. Г.Л. Агафонова; под ред. П.А. Власова / Ю. Варнатц, У. Маас, Р. Диббл — М.: Физматлит, 2003. - 352 с.

3. Shaye Yungster Computation of Shock-Induced Combustion Using a Detailed Methane-Air Mechanism [Текст] / Martin J. Rabinowitz // Journal of propulsion and power. – Vol. 10, No. 5, Sept.-Oct. 1994.

4. Планковский, С.И. Моделирование термоимпульсной обработки с учетом неоднородности топливной смеси [Текст] / С.И. Планковский, О.В. Шипуль, О.В.Трифонов, О.С. Борисова // Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии: сб. науч. тр. Нац. аэрокосм. ун-та им. Н.Е. Жуковского «ХАИ». – Вып. 46. – Х., 2010. – С. 75-87.

**Рецензент:** д-р техн. наук, профессор, А.И. Долматов, зав. кафедрой технологии авиадвигателестроения, Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Харьков, Украина.

Поступила в редакцию 10.02.2014

### **Вплив вибору моделей горіння та механізмів реакцій на достовірність прогнозування переходу горіння в детонацію**

Проведено порівняльний аналіз моделей горіння та механізмів реакцій горіння метану. Розроблено математичну модель для розрахунку процесу горіння в замкнутій циліндричній камері постійного об'єму з урахуванням переходу процесу згоряння паливної суміші з дефлаграційного в детонаційний режим. Показано, що використання моделі кінцевої швидкості хімічної реакції із застосуванням інтегрального механізму окиснення метану, не можна застосовувати для розрахунку переходу горіння в детонацію. Використання ж моделі швидкості горіння із застосуванням докладного механізму окиснення метану дозволило найбільш точно описувати явище переходу згоряння в детонацію, що може бути використано для розрахунку режимів термоімпульсної обробки.

**Ключові слова:** модель кінцевої швидкості хімічної реакції, модель швидкості горіння, докладний механізм окиснення, інтегральний механізм окиснення, детонація, перехід горіння в детонацію, математичне моделювання.

### **The combustion models and reaction mechanisms influence to the reliable prediction of the deflagration to detonation transition**

A comparative analysis of combustion models and reaction mechanisms of methane combustion was carried out. A mathematical model for calculating the combustion process in a constant volume closed cylindrical chamber taking into account the deflagration to detonation transition. It was shown that the use of the model finite rate chemical reaction in applying the global mechanism of methane oxidation is not applicable to the calculation of transition from combustion to detonation. Using the Burning velocity model with detailed mechanism for the methane oxidation, will most accurately describes the phenomenon of transition to detonation combustion, which can be used to calculate regimes for thermal pulse deburring.

**Keywords:** model of the finite rate chemical reaction, Burning velocity model, detailed mechanism of methane oxidation, integrated oxidation mechanism, detonation, deflagration to detonation transition, mathematical modeling.