

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ТРЕХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ВОДОРОДА

И. А. Бедарев, А. В. Федоров

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск, fedorov@itam.nsc.ru

Выполнен анализ трех моделей химической кинетики горения водорода в кислороде и трех газодинамических моделей течения реагирующей смеси за фронтом инициирующей ударной волны. Проведено сравнение данных расчета с экспериментом по зависимостям времени задержки воспламенения от температуры. Показана значимость выбора критерия, по которому определяется время задержки воспламенения при сравнении с экспериментальными данными. Численный анализ трех кинетических схем воспламенения водорода показал, что схема с 38 реакциями восьми компонентов наилучшим образом описывает экспериментальные данные в диапазоне температур $1\,000 \div 2\,800$ К.

Ключевые слова: воспламенение водорода, время задержки воспламенения, ударные волны, математическое моделирование, неравновесная газодинамика.

ВВЕДЕНИЕ

Физико-математическое моделирование поведения газовых реакционноспособных смесей под воздействием ударно-волновой нагрузки является важной и актуальной проблемой, в особенности в связи с возросшим интересом к использованию детонации в новых поколениях двигателей. Здесь представляется обоснованным применение некоторых достаточно простых кинетических моделей процессов воспламенения и последующего сверхзвукового горения газовых смесей, которые тем не менее дают достоверную информацию о динамике превращений по мере развития реакции и адекватно описывают процесс как на стадии воспламенения, так и на стадии горения. К числу основных параметров, по которым можно судить об адекватности моделирования стадии воспламенения, относятся такие интегральные параметры, как пределы воспламенения и время задержки воспламенения (период индукции).

При моделировании течений с горением водорода встает вопрос о выборе кинетического механизма горения водорода. Отметим, что исследованию данного механизма посвящено большое количество работ (см. библиографию в [1–3]). Широко применяются приведенные двухстадийные модели химического превращения, когда уравнением аррениусовского типа моделируется стадия периода индукции, а затем этап тепловыделения [2]. Однако использование таких моделей при расчетах тече-

ний с детонацией затруднено в связи с проблемой достоверного определения эмпирических констант, а иногда и неприменимостью двухэтапного подхода для некоторых критических режимов детонации. Поэтому наряду с упрощенными подходами для моделирования реакции окисления водорода используются детальные кинетические механизмы. В литературе можно найти множество детальных кинетических схем, для которых подбираются кинетические константы в соответствии с теоретическим анализом или по тем или иным экспериментальным данным. В [3] приведен достаточно полный механизм горения водорода в кислороде, даны границы разброса значений констант скоростей прямых и обратных реакций и проанализирована роль отдельных реакций. Однако для выбора конкретной кинетической схемы и значений констант скорости желательное сравнение с экспериментальными данными из нескольких источников и по нескольким параметрам.

В настоящей работе для этой цели использованы детальные кинетические схемы [3–5] и проведено сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными [6–10] по зависимостям времени задержки воспламенения от температуры. Расчеты воспламенения и горения водорода за ударной волной в смеси $\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{Ar}$, содержащей $1 \div 10$ % $\text{H}_2 + \text{O}_2$, выполнены при температурах $800 < T < 2\,500$ К и давлениях $0.3 < p_1 < 5$ атм.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

Рассмотрим ударную трубу, заполненную смесью водорода, кислорода и аргона. По смеси распространяется ударная волна (УВ). При некоторых значениях числа Маха УВ параметры смеси могут превысить критические значения и произойдет воспламенение.

В одномерной постановке динамика смеси описывается уравнениями неравновесной газовой динамики:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho E + p)u]}{\partial x} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где $E = e + u^2/2$ — полная энергия, ρ , u , p , e — плотность, скорость, давление и внутренняя энергия смеси соответственно. Внутренняя энергия реакционноспособной смеси определяется из соотношения

$$e = c_v T + \sum_{\alpha=1}^{\mu} \xi_{\alpha} h_{0\alpha} - c_p T_{00},$$

где c_p , c_v — удельные теплоемкости смеси при постоянном давлении и постоянном объеме, $c_v = \sum_{\alpha=1}^{\mu} c_{v\alpha} \xi_{\alpha}$, ξ_{α} — относительная массовая концентрация компонента α , $h_{0\alpha}$ — энтальпия образования компонента α , μ — количество компонентов смеси, $T_{00} = 298.15$ К. Система (1), дополненная уравнением состояния

$$p = \rho T R \sum_{\alpha=1}^{\mu} \frac{\xi_{\alpha}}{M_{\alpha}} \quad (2)$$

и кинетическими уравнениями (приведенными ниже), позволяет после постановки соответствующей начально-краевой задачи рассчитать процесс распространения УВ в канале (здесь T — температура, R — универсальная газовая постоянная, M_{α} — молекулярная масса компонента α). Будем называть данную модель нестационарной.

Для описания химических превращений использовались детальные кинетические механизмы [3–5], включающие соответственно 60,

42 и 38 прямых и обратных реакций восьми химических компонентов: H_2 , O_2 , H_2O , OH , H , O , HO_2 , H_2O_2 . В [3–5] приведены константы скоростей прямых и обратных реакций. Кинетический механизм, представленный в [3], является максимально полным механизмом окисления водорода. Он включает в себя реакции, которые входят в схемы [4] и [5]. Кинетическая схема [4] применялась во многих работах по моделированию горения и детонации водорода, в частности в [11] для изучения пределов детонации водородовоздушных смесей. Кинетическая схема, приведенная в работе [5], использована в ней для численного моделирования горения в сверхзвуковом слое смешения. Фактически все три кинетические схемы отличаются только константами скоростей.

В общем виде стехиометрическое уравнение реакции имеет вид

$$\sum_{\alpha=1}^{\mu} \nu_{\alpha r} A_{\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{\mu} \nu'_{\alpha r} A'_{\alpha}.$$

Здесь A_{α} — химические символы исходных реагирующих веществ, ν_{α} — стехиометрические коэффициенты, штрихом обозначены величины, относящиеся к продуктам реакции, индексом r — номер реакции. Если химический компонент A_{α} не является исходным продуктом (продуктом реакции), соответствующий стехиометрический коэффициент равен нулю.

Молярно-объемная скорость образования компонента α в r -й реакции выражается формулой

$$R_{\alpha r} = (\nu'_{\alpha r} - \nu_{\alpha r}) \times \left[k_{fr} \prod_{\alpha=1}^{\mu} W_{\alpha}^{\nu_{\alpha r}} - k_{br} \prod_{\alpha=1}^{\mu} W_{\alpha}^{\nu'_{\alpha r}} \right].$$

Здесь k_{fr} , k_{br} — скорости прямой и обратной реакций; $W_{\alpha} = \rho_{\alpha}/M_{\alpha}$ — молярно-объемная концентрация, моль/м³; ρ_{α} — парциальная плотность, $\rho_{\alpha} = \xi_{\alpha} \rho$, $\rho = \sum_{\alpha=1}^{\mu} \rho_{\alpha}$ — плотность смеси. Тогда уравнения химической кинетики для молярно-объемных концентраций принимают вид

$$\frac{dW_{\alpha}}{dt} = \sum_{r=1}^l R_{\alpha r},$$

где l — число реакций.

В итоге изменения относительных массовых концентраций компонентов находятся из решения уравнений химической кинетики:

$$\frac{d\xi_\alpha}{dt} = \frac{1}{\rho} M_\alpha \sum_{r=1}^l \rho^{m_r} (\nu'_{\alpha r} - \nu_{\alpha r}) \times \\ \times \left[k_{fr} \prod_{\beta=1}^{\mu} \left(\frac{\xi_\beta}{M_\beta} \right)^{\nu_{\beta r}} - k_{br} \prod_{\beta=1}^{\mu} \left(\frac{\xi_\beta}{M_\beta} \right)^{\nu'_{\beta r}} \right], \quad (3)$$

где m_r — порядок r -й реакции, $\alpha = 1, \dots, \mu$. Тем самым задача определения параметров смеси в ударной трубе свелась к решению некоторой начально-краевой задачи для системы уравнений в частных производных (1) и уравнений (3) вдоль траектории элемента среды.

Если процесс воспламенения смеси в ударной трубе считать стационарным и перейти к автомодельной переменной, связанной с координатой фронта УВ, $\zeta = x - Dt$, где D — скорость УВ, то задача о бегущей волне воспламенения сведется к решению обыкновенного дифференциального уравнения для скорости:

$$\frac{du}{d\zeta} = \frac{1}{u^2 - c_f^2} \left(\frac{R}{c_v M_{mix}} \sum_{\alpha=1}^{\mu} \frac{d\xi_\alpha}{dt} \times \right. \\ \left. \times (c_{v\alpha} T + h_{0\alpha} - c_{p\alpha} T_{00}) - RT \sum_{\alpha=1}^{\mu} \frac{1}{M_\alpha} \frac{d\xi_\alpha}{dt} \right), \quad (4)$$

здесь M_{mix} и c_f — молекулярная масса и заморозенная скорость звука смеси. Значения остальных газодинамических параметров в зоне химической релаксации находятся из законов сохранения массы, импульса и энергии. Дополнив уравнение (4) уравнениями химической кинетики (3) с учетом соотношения $\frac{d}{dt} = (u - D) \frac{d}{d\zeta}$, получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений, для которой ставится задача Коши с начальными условиями для массовых концентраций

$$\xi_\alpha|_{t=0} = \xi_{\alpha 0} \quad (5)$$

и начальным условием для скорости

$$u|_{t=0} = u_f,$$

где u_f — скорость за фронтом заморозенной УВ. Назовем эту модель стационарной.

Так как нами рассматриваются смеси, в которых большую часть занимает инертный

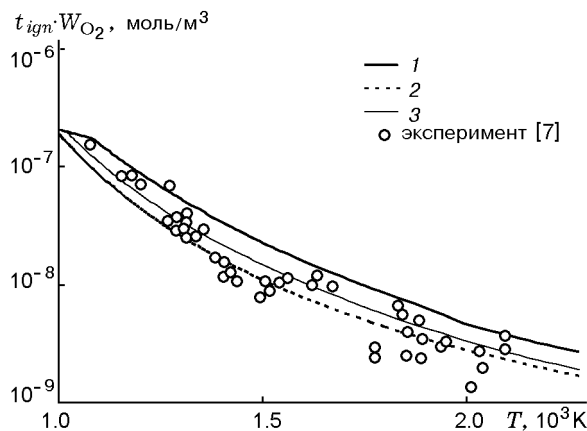


Рис. 1. Сравнение критериев воспламенения: 1 — максимум концентрации ОН, 2 — максимум роста концентрации ОН, 3 — максимум роста температуры

газ (до 99 %), то при некотором предельном значении суммарной начальной массовой концентрации водорода и кислорода в смеси $\xi_{H_2} + O_{2,0} < \xi_{H_2}^* + O_{2,0}^*$ (по нашим оценкам $\xi_{H_2}^* + O_{2,0}^*$ не превышает 10 %) изменением температуры вследствие тепловыделения, а значит, и других газодинамических параметров можно пренебречь и вести расчет в изотермическом приближении. В этом случае модель включает уравнения химической кинетики (3) с начальными данными (5), а газодинамические параметры среды постоянны и равны соответствующим параметрам за замороженной УВ. Назовем эту модель изотермической.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

Выбор критерия воспламенения

Остановимся на интерпретации расчетных данных в задаче о воспламенении смеси за проходящей УВ. Важным моментом при этом является выбор критерия, по которому определяется момент воспламенения [1]. На рис. 1 приведены зависимости времени задержки воспламенения (t_{ign}), рассчитанные по трем наиболее часто используемым критериям, от температуры за УВ. В качестве критериев рассматривались максимум концентрации радикала ОН, максимум роста концентрации радикала ОН, максимум роста температуры. Расчеты выполнены с использованием стационарной модели (3), (4) и кинетического механизма [3] с 60

Условия экспериментов и критерии воспламенения

Номер опыта	H ₂ , %	O ₂ , %	p ₁ , атм	Источник	Критерий
1	8	2	5	[6]	$\xi_{\text{ОН}}^{\text{max}}$
2	4	2	1	[7]	$\xi_{\text{ОН}}^{\text{max}}$
3	1	2	1	[7]	$\xi_{\text{ОН}}^{\text{max}}$
4	1	1	3	[8]	$\xi_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{max}}$
5	6.66	3.33	1.9	[9]	$\dot{T}_{\text{ОН}}^{\text{max}}$
6	2H ₂ + O ₂ , %		0.3 < p ₁ < 2	[10]	$\xi_{\text{ОН}^*}^{\text{max}}$
	1.4				
	2.5				
	5.6				

реакциями. Видно, что результаты определения зависимости $t_{\text{ign}}(T)$ различными способами могут существенно различаться (в 2–3 раза). Критерии максимума роста концентрации радикала ОН и максимума роста температуры попадают в разброс экспериментальных данных [7], в которых критерием воспламенения считался момент максимума роста концентрации радикала ОН.

Тем самым следует еще раз подчеркнуть важность определения критерия задержки воспламенения при сравнении с экспериментальными данными. Для верификации математической модели были выбраны экспериментальные данные, в которых явно указывался критерий определения t_{ign} .

Далее в работе результаты расчетов с использованием изотермической модели для трех кинетических механизмов сравниваются с опытными данными по задержкам воспламенения в зависимости от температуры за УВ, затем расчетные данные по различным моделям сравниваются между собой для кинетического механизма с 38 реакциями [5].

Сопоставление результатов расчетов по различным моделям химической кинетики для изотермической модели газодинамики

Интегрирование задачи Коши (3), (5) выполнено с помощью решателя жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений RADAU5. Проведено сравнение моделей химической кинетики горения водорода [3–5] с экспериментальными данными [6–10]. В таблице указаны условия экспериментов и критерии, по

которым определялось t_{ign} .

В [6] для смеси 8 % H₂, 2 % O₂ и 90 % Ar измерена максимальная концентрация радикала ОН в зависимости от температуры при давлении за УВ $p_1 = 5$ атм.

В [7] исследованы времена задержки воспламенения смесей 4 % H₂, 2 % O₂, 94 % Ar и 1 % H₂, 2 % O₂, 97 % Ar в зависимости от температуры при $p_1 = 1$ атм. Временем задержки воспламенения считалась максимальная скорость изменения концентрации радикала ОН.

В [8] приведены экспериментальные данные зависимости времени задержки воспламенения смеси 1 % H₂, 1 % O₂, 98 % Ar от температуры при $p_1 = 3$ атм. В качестве критерия воспламенения использован момент максимальной скорости изменения концентрации H₂O.

В [9] методом отраженных УВ измерено время задержки воспламенения смеси 6.66 % H₂, 3.33 % O₂ и 90 % Ar при $p_1 = 1.9$ атм. Критерием времени задержки воспламенения считался момент максимума роста температуры.

В [10] выполнено измерение люминесцентного свечения иона радикала ОН* при температурах $1000 < T < 2500$ К и давлениях $0.3 < p_1 < 2$ атм в течение процесса воспламенения и горения водорода за УВ в смеси H₂, O₂, Ar (рассмотрены стехиометрические смеси 2H₂ + O₂, в которых содержалось 1.4 ÷ 5.6 % 2H₂ + O₂). Там же приведены экспериментальные данные по времени t^* между моментом прохождения УВ через некоторую точку и максимумом сигнала свечения радикала ОН* в этой точке. Это время можно считать одним из эквивалентов времени задержки воспламенения.

На рис. 2 для сравнения приведены расчетные данные по трем кинетическим схемам и результаты экспериментов [6, 7] по зависимости времени задержки воспламенения $t_{\text{ign}}W_{\text{O}_2,0}$ от температуры за УВ ($W_{\text{O}_2,0}$ — начальная молярно-объемная концентрация O₂). Видно, что все кинетические схемы правильно предсказывают величину t_{ign} в диапазоне температур $1000 < T < 2500$ К и занижают t_{ign} при $T < 1000$ К. Кинетические схемы с 60 [3] и с 42 реакциями [4] дают практически одинаковые результаты, а результаты расчетов по схеме [5] с 38 реакциями незначительно отличаются от них при $T > 2000$ К, но лучше согласуются с экспериментальными данными в этом диапазоне. Очевидно, что в диапазоне температур

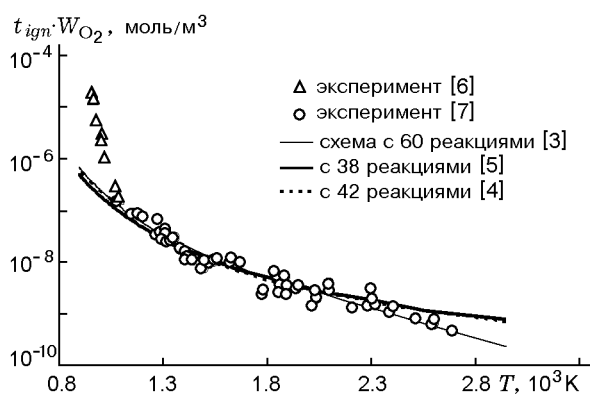


Рис. 2. Времена задержки воспламенения, умноженные на начальную концентрацию O_2 , в зависимости от температуры за УВ в сравнении с экспериментами [6, 7]

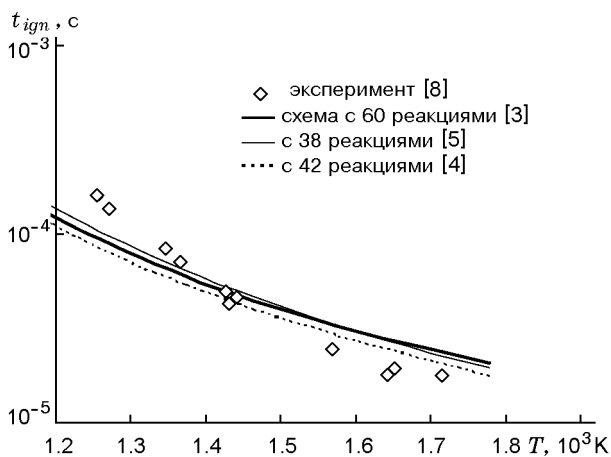


Рис. 3. Времена задержки воспламенения в зависимости от температуры за УВ в сравнении с экспериментом [8]

$T < 1000$ К для лучшего соответствия эксперименту [6] необходима корректировка констант скорости.

На рис. 3 представлены расчетные данные по трем кинетическим схемам и результаты экспериментов [8]. И в расчете, и в эксперименте в качестве критерия использован момент максимальной скорости изменения концентрации H_2O . Наблюдается удовлетворительное согласование расчетов по всем трем схемам с экспериментом.

Сопоставление расчетов по трем схемам и экспериментов [9] приведено на рис. 4. В расчете применялась стационарная модель, так как в качестве критерия t_{ign} в эксперименте взят мо-

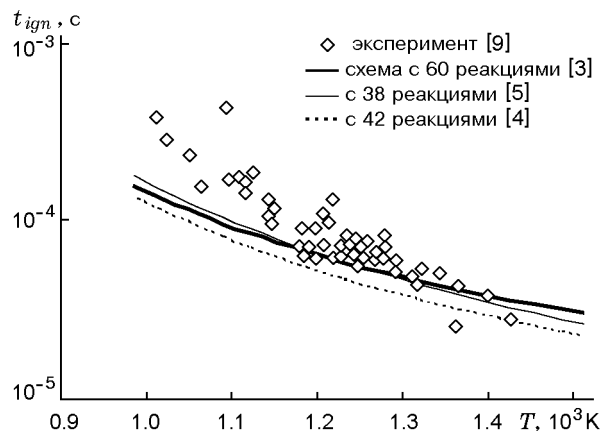


Рис. 4. Времена задержки воспламенения в зависимости от температуры за УВ в сравнении с экспериментом [9]

мент максимума роста температуры. Наблюдается хорошее совпадение результатов расчетов и эксперимента при $T > 1100$ К.

Было проведено сравнение результатов расчета с экспериментальными данными [10]. Расчеты выполнены для смесей Ar с 1.4, 2.5, 5.6 % смеси $2H_2 + O_2$ в условиях, соответствующих экспериментальным: давление за УВ $0.3 < p_1 < 2$ атм, температура за УВ $1000 \div 2200$ К. Для получения нужной температуры за УВ в эксперименте изменялось давление в камере низкого давления перед УВ.

На рис. 5 представлена опытная зависимость давления за УВ (p_1) от давления перед УВ (p_0). В расчетах из данной зависимости с помощью интерполяции выбирались значения p_0 и p_1 и затем из соотношений на разрыве определялась температура за УВ. Для контроля на рис. 5 указаны также расчетные и экспериментальные значения температуры за УВ.

На рис. 6 приведены результаты экспериментов [10] и расчетов с помощью кинетической схемы [5] (38 реакций) времени задержки воспламенения для составов с 1.4, 2.5, 5.6 % смеси $2H_2 + O_2$. В этом случае наблюдается не столь хорошее согласование расчетных и экспериментальных данных, в расчете время задержки воспламенения оказалось заниженным. В качестве критерия времени задержки воспламенения нами использовался момент максимума скорости изменения концентрации радикала OH.

На рис. 7 показаны данные [10] и результаты расчетов с помощью кинетической схе-

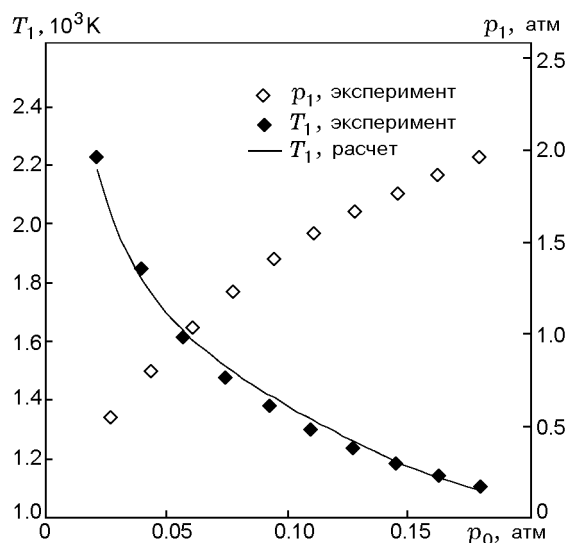


Рис. 5. Экспериментальная зависимость [10] давления за УВ от давления перед УВ. Сравнение экспериментальных и расчетных температур за УВ в зависимости от давления перед УВ

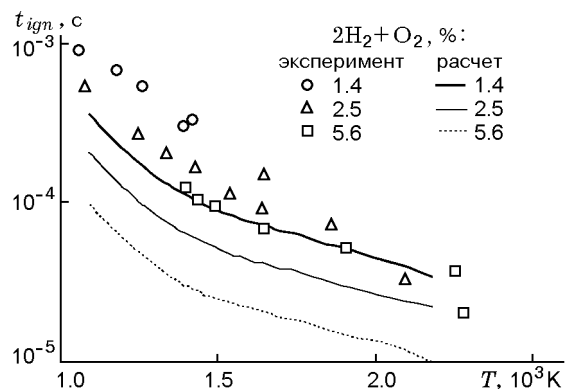


Рис. 6. Эксперимент [10] и расчет по кинетической схеме [5] с 38 реакциями для смесей с различной начальной концентрацией $2\text{H}_2 + \text{O}_2$

мы [4] с использованием двух критериев воспламенения: момент максимальной концентрации радикала OH ($\xi_{\text{OH}}^{\text{max}}$) и момент максимальной скорости изменения концентрации радикала OH ($\dot{\xi}_{\text{OH}}^{\text{max}}$). Видно, что для кинетической схемы [4] значения t_{ign} , полученные с использованием обоих критериев, ниже наблюдаемых в опытах [10]. Но еще большие отличия получаются, как показали расчеты, для кинетического механизма [5].

Расхождения расчетных и опытных дан-

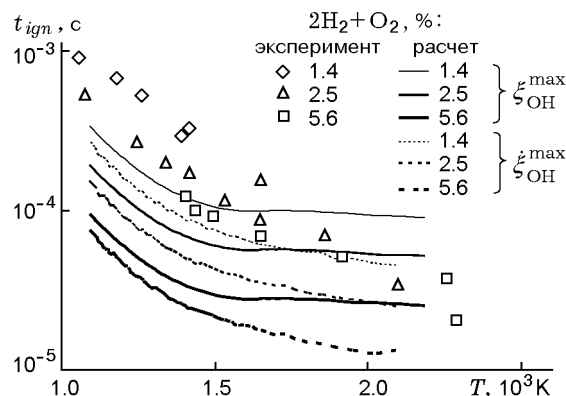


Рис. 7. Эксперимент [10] и расчет по кинетической схеме [4] с 42 реакциями для смесей с различной начальной концентрацией $2\text{H}_2 + \text{O}_2$

ных можно объяснить тем, что в эксперименте [10] временем задержки воспламенения считалось время между моментом прохождения УВ через некоторую точку и максимумом сигнала свечения иона радикала OH^* в этой точке. Очевидно, что это время может не соответствовать ни моменту максимальной концентрации радикала OH , ни моменту максимальной скорости изменения концентрации радикала OH . Поиск в расчете собственно момента максимума сигнала свечения радикала OH^* потребует вовлечения дополнительных параметров в модель (1)–(3), (5).

Сопоставление газодинамических моделей течения

Теперь перейдем к сравнению различных газодинамических моделей воспламенения смеси. Для начала необходимо определить поведение температуры за УВ в зоне химической релаксации. Влияние начальной концентрации смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ на структуру течения представлено на рис. 8. Показано расчетное распределение температуры смеси при прохождении УВ с температурой за фронтом 1500 К, полученное с использованием стационарной модели (4), учитывающей тепловыделение, и кинетической схемы [5] (38 реакций).

Влияние интенсивности УВ иллюстрирует рис. 9. Приведено расчетное распределение температуры для трех различных начальных температур (1000, 1500 и 2000 К) за УВ для 5 %-й начальной концентрации $2\text{H}_2 + \text{O}_2$. Из рис. 8, 9 видно, что температура в зоне релаксации может возрастать на $100 \div 200$ К

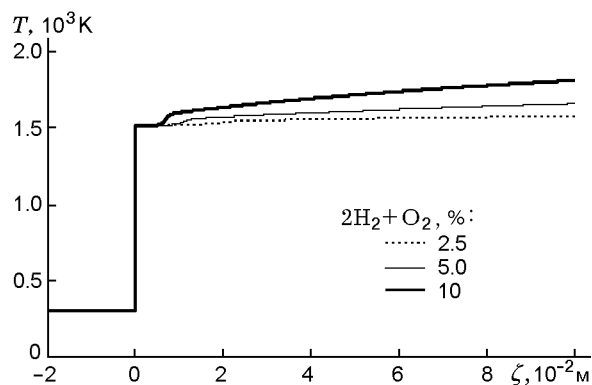


Рис. 8. Расчетное распределение температуры смеси при начальной температуре за ударной волной 1500 К

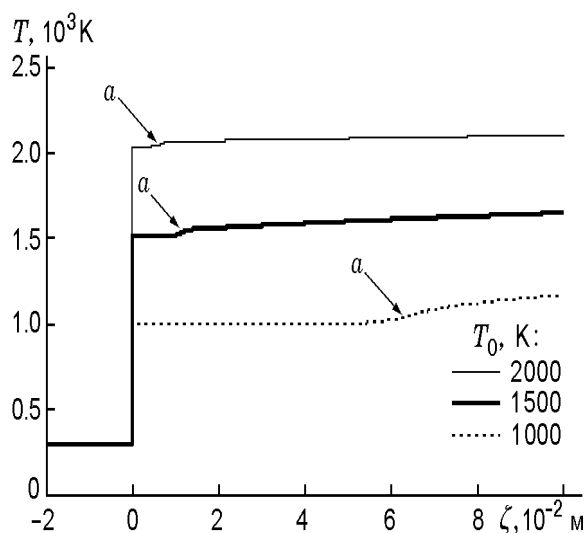


Рис. 9. Расчетное распределение температуры при 5 %-й начальной концентрации $2\text{H}_2 + \text{O}_2$

($\approx 5 \div 10\%$) и этот рост тем выше, чем выше начальная концентрация реагентов $2\text{H}_2 + \text{O}_2$. По представленным данным можно судить о точности модели, в которой предполагалось постоянство температуры за лидирующей УВ. До тех пор пока суммарная начальная концентрация $\text{H}_2 + \text{O}_2$ в смеси не превышает некоторого значения ($\xi_{\text{H}_2 + \text{O}_2,0} < \xi_{\text{H}_2 + \text{O}_2,0}^*$), можно считать, что реакция протекает при постоянной температуре. На рис. 9 по распределению температуры можно определить момент воспламенения смеси по критерию максимума роста температуры (см. точку *a*).

Перейдем к характеристикам течения, полученным на основе нестационарной модели.

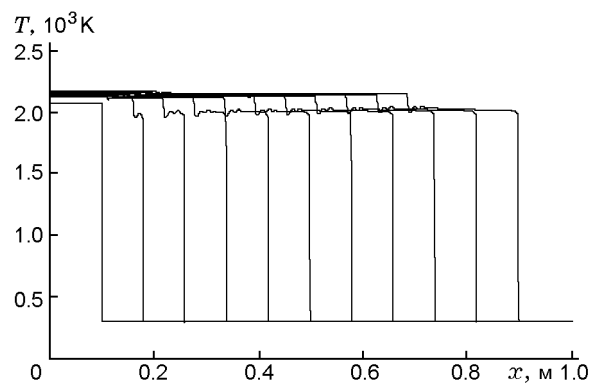


Рис. 10. Расчетное распределение температуры в различные моменты времени при 2.5 %-й начальной концентрации $2\text{H}_2 + \text{O}_2$

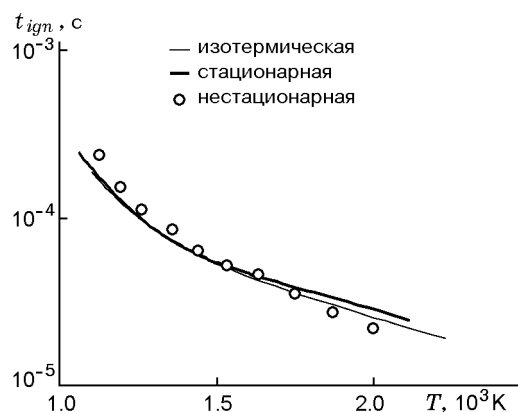


Рис. 11. Сравнение времен задержки воспламенения, полученных по трем различным газодинамическим моделям, при 2.5 %-й начальной концентрации $2\text{H}_2 + \text{O}_2$

На рис. 10 представлены расчетные профили температуры в различные моменты времени, полученные с использованием кинетической схемы [5] для начальной концентрации смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ 2.5%. Численное решение системы уравнений (1) получено на основе TVD-схемы и метода расщепления Ван Лира. В качестве начальных данных задавалась УВ, распространяющаяся со скоростью, соответствующей числу Маха $M = 4.5$. В начальный момент времени УВ распространяется слева направо, слегка усиливаясь из-за тепловыделения. Из рис. 10 видно, что со временем решение выходит на стационарный режим, при котором температура за УВ составляет примерно 2000 К.

На рис. 11 приведены значения t_{ign} в за-

висимости от температуры за УВ, полученные с использованием трех различных газодинамических моделей процесса: изотермической, стационарной и нестационарной. Как и в предыдущем случае, использована кинетическая схема [5]. Представлены результаты расчетов для начальной концентрации $2\text{H}_2 + \text{O}_2$, равной 2.5 %. Видно, что результаты расчетов по всем трем моделям близки. Это также позволяет утверждать, что воспламенение реагирующей смеси водорода и кислорода с большой примесью инертного газа при ударно-волновом взаимодействии можно описывать с помощью изотермической математической модели, если концентрация реагентов не превышает некоторого предельного значения $\zeta_{\text{H}_2 + \text{O}_2,0}^*$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведен сравнительный анализ трех моделей химической кинетики горения водорода в кислороде и трех газодинамических моделей течения реагирующей смеси за фронтом инициирующей ударной волны. Сравнение данных расчета с экспериментом по зависимостям времени задержки воспламенения от температуры показало, что наилучшее согласование для всех моделей химической кинетики достигнуто с данными экспериментов [7–9]. Численный анализ рассчитанных кинетических схем горения водорода показал, что схема [5] с 38 реакциями восьми компонентов наилучшим образом описывает эти экспериментальные данные. Из сравнения с экспериментом [6] видно, что ни одна схема не обеспечивает адекватного предсказания времени задержки воспламенения при температурах ниже 1 000 К. В этом диапазоне температур требуется корректировка констант скоростей реакции.

Показано, что при малых начальных концентрациях водородокислородной смеси в аргоне даже простая модель, в которой не учитывается влияние тепловыделения на параметры газа, позволяет удовлетворительно описать зависимости периода индукции от температу-

ры. С ростом начальной концентрации реагирующих компонентов следует применять математическую модель, учитывающую изменение температуры смеси.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Кондратьев В. Н., Никитин Е. Е.** Химические процессы в газах. М.: Наука, 1981.
2. **Коробейников В. П., Левин В. А.** Сильный взрыв в горючей смеси газов // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1969. № 6. С. 48–51.
3. **Димитров В. И.** Простая кинетика. Новосибирск: Наука, 1982.
4. **Warnatz J.** Combustion Chemistry / W. C. Gardiner (Ed.). Berlin: Springer-Verlag, 1984.
5. **Tien J. H., Stalker R. J.** Release of chemical energy by combustion in a supersonic mixing layer of hydrogen and air // Combust. Flame. 2002. N 130. P. 329–348.
6. **Skinner G. B., Ringrose G. H.** Ignition delays of a hydrogen-oxygen-argon mixture at relatively low temperatures // J. Chem. Phys. 1965. N 42. P. 2190–2204.
7. **Schott G. L., Kinsey J. L.** Kinetic studies of hydroxyl radicals in shock waves. II. Induction times in the hydrogen-oxygen reactions // J. Chem. Phys. 1958. N 29. P. 1177–1188.
8. **Hidaka Y., Sato K., Henmi Y., et al.** Shocktube and modeling study of methane pyrolysis and oxidation // Combust. Flame. 1999. N 118. P. 340–358.
9. **Cheng R. K., Oppenheim A. K.** Autoignition in methane-hydrogen mixtures // Combust. Flame. 1984. N 58. P. 125–139.
10. **Skrebkov O. V., Karkach S. P., Vasil'ev V. M., Smirnov A. L.** Hydrogen-oxygen reactions behind shock waves assisted by $\text{OH}(^2\Sigma^+)$ formation // Chem. Phys. Lett. 2003. V. 375, N 3–4. P. 413–418.
11. **Агафонов Г. Л., Фролов С. М.** Расчет пределов детонации газовых водородсодержащих смесей // Физика горения и взрыва. 1994. Т. 30, № 1. С. 92–100.

*Поступила в редакцию 9/XI 2004 г.,
в окончательном варианте — 14/III 2005 г.*