

МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ “ПРОБЛЕМЫ ЭФФЕКТИВНОСТИ И ДОСТОВЕРНОСТИ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ, ВЗРЫВА И ДЕТОНАЦИИ” (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 23 сентября 2020 г.)

В Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова 23 сентября 2020 г. состоялась конференция, посвященная проблемам эффективности и достоверности численного моделирования процессов горения и детонации, которая проходила в рамках семинара кафедры газовой и волновой динамики под руководством академика Р.И. Нигматулина по инициативе председателя Российской секции Международного института горения профессора Н.Н. Смирнова. Задачами конференции являлось обсуждение эффективности использования численных методов в процессах горения и взрыва и взаимосвязь численного моделирования и экспериментальных исследований, было так же отмечено, что в настоящее время компьютеризация играет решающую роль в прогрессе фундаментальных и прикладных исследований.

В.В. Азатян в своем докладе указал на цепную природу реакций газофазного горения и на связанное с этим большое значение применения численных методов для получения информации о факторах, ответственных за наблюдаемые специфические явления и закономерности. Вместе с тем, он обратил внимание на неэффективность работ, имеющих целью лишь описание наблюдаемых закономерностей горения. Такое описание известных закономерностей могло бы представлять интерес, но только для проверки гипотетических отдельных реакций и если доказана точность в целом реакционной схемы и входных параметров. Однако, к настоящему времени в схеме кинетических механизмов даже наиболее изученного модельного процесса горения водорода не известен, например, вклад гетерогенных реакций гибели атомов и радикалов, несмотря на их ключевую роль, поскольку они блокируют горение. Механизмы окисления органических соединений и константы скоростей ключевых стадий в настоящее время практически не известны.

Большой проблемой является также учет пространственных и временных изменений температуры и концентраций активных промежуточных частиц, что связано с наличием стенок и макроscopicких частиц в потоке, на которых происходят гетерогенные реакции, константы скоростей которых отсутствуют. В связи с этим актуальными являются численные расчеты поискового ха-

рактера, не претендующие на детальное описание или относящиеся к процессам, достоверность механизмов которых и точность входных параметров позволяют сделать соответствующие выводы.

Академик Р.И. Нигматулин отметил, что В.В. Азатян в своем докладе показал очень важное обстоятельство в кинетике химических реакций. Традиционные кинетические схемы химических реакций в условиях горения могут приводить к большим ошибкам из-за влияния малых концентраций некоторых компонентов (иммобилайзеров), отвлекающих на себя другие компоненты, активно участвующие в химической реакции. Поэтому кинетическая модель горения должна учитывать эффект иммобилайзеров, которые используются в практике для предотвращения или существенного замедления горения.

Академик Э.Е. Сон отметил, что проблема справедливости закона Аррениуса для описания скоростей химических реакций в последнее время стала предметом оживленных дискуссий, так, начиная с 2005 г., появился ряд статей, в которых утверждалось, что в термодинамически равновесной среде квантовые поправки к функции распределения частиц приводят к тому, что равновесная функция распределения становится немаквелловской, поэтому закон Аррениуса нарушается. Эти работы, однако, противоречат фундаментальным законам, таким как выражение для энтропии Гиббса, и необходимы исследования и публикация результатов в этом направлении. В докладе В.В. Азатяна рассматривается другая причина возможного нарушения закона Аррениуса, связанная с протеканием цепных реакций при горении или детонации. Если система не находится в полном термодинамическом равновесии и возникают цепные реакции, идущие с образованием и разрушением цепей, то, поскольку цепной процесс может нарушаться в нескольких механизмах, связанных с взаимодействием радикалов между собой, нарушением цепи в реакциях на стенках или гетерогенных частицах, таких как сажа, то любое нарушение цепи может привести не только к нарушению закона Аррениуса, но и, например, к зависимости скорости реакции от объема, что и наблюдается в некоторых экспериментах. Можно сформулировать общие условия, при которых возможно нарушение классического

закона Аррениуса, при этом изменятся скорости фронтов горения и законы детонации, поэтому при анализе экспериментальных данных эти процессы должны приниматься во внимание.

Профессор Н.Н. Смирнов в своем выступлении отметил, что различия в кинетических механизмах реакций могут не оказывать влияния на определение средних характеристик волн детонации и горения, но они существенны при расчете структуры детонационных волн и переходных процессов, связанных с возникновением детонации или с разрушением детонационной волны (ингибированием детонации). Для прогнозирования таких переходных неравновесных процессов необходимо использовать достоверные кинетические механизмы, проверенные для данных классов веществ и диапазонов определяющих параметров.

Ведущий научный сотрудник лаборатории наномеханики МГУ А.А. Крупнов обратил внимание на необходимость учета в задачах численного моделирования горения смеси газов около твердых поверхностей подробного механизма гетерогенного каталитического взаимодействия, которое существенно влияет как на тепловую нагрузку, так и на химический состав газа в приповерхностной области. Однако, это является сложной много-

масштабной задачей, включающей в себя квантовомеханический, термодинамический и молекулярно динамический подходы и требующей значительных компьютерных ресурсов.

Доцент В.Ф. Никитин обратил внимание на то, что образование тонких структур детонации, таких как ячеистая структура, не связано непосредственно с цепным механизмом реакции, поскольку у многих авторов такие ячейки получались и для моделей с одной реакцией. Вместе с тем параметры тонкой структуры, размер ячеек и регулярность структуры в большой степени зависят от конкретного кинетического механизма, от граничных условий и от учета явлений переноса. Если при этом учитывать взаимодействие радикалов со стенкой (как адсорбцию, как в механизме Азатяна В.В., так и иные варианты взаимодействия), то получится, что структура детонации в окрестности внутренней стенки трубы должна зависеть в том числе и от характера самого напыления, используемого для индикации этой структуры. Для того, чтобы оценить степень такой зависимости, требуется создать теорию волн горения и детонации в тонком слое вблизи стенки с гетерогенными реакциями.

В.В. Азатян