

# 气相爆轰波 DDT 过程的物理模型

张文硕<sup>1,2</sup>, 刘云峰<sup>1,2</sup>, 姜宗林<sup>1,2</sup><sup>1</sup> (中国科学院大学工程科学学院, 北京 100049) <sup>2</sup> (中国科学院力学研究所, 北京 100190)

**摘要:** 气相爆轰波的爆燃转爆轰过程 (deflagration to detonation transition, DDT) 所需的起爆能量比直接起爆小几个数量级, 是一种经济有效的起爆方式。DDT 过程涉及激波动力学、湍流燃烧、化学反应动力学等多种效应, 包含丰富的物理机制, 这些机制的相互作用规律仍不明确, 是一项具有挑战性的前沿课题。本研究根据 DDT 的数值模拟结果和相关实验规律, 提出了一个 DDT 的物理模型, 该模型的核心思想是: 在实验室坐标系下, 爆轰波面和火焰面是跨声速的, 火焰面的超声速和亚声速流动会产生不同的流动行为, 直接影响爆轰波的 DDT 过程, 爆轰波面的跨声速流动是产生 DDT 过程的关键机制。通过提出的物理模型和一维数值模拟, 采用总包一步反应模型和详细反应模型, 均得到了 DDT 的物理过程, 利用该物理模型解释了两种计算结果的差异以及和 DDT 有关的各种实验现象。

**关键词:** 气相爆轰, 爆燃转爆轰, DDT, 物理模型

## 引言

爆轰是一种快速、高效的能量转换方式, 爆轰波波面处的能量密度可达到  $10^6 \text{W/cm}^2$ 。在不同的起爆方式下, 爆轰的起爆分为直接起爆和爆燃转爆轰 (deflagration to detonation transition, DDT) 两种方式。DDT 需要的起爆能量可以比直接起爆小几个数量级<sup>1</sup>, 是一种经济有效的起爆方式。在实际应用中, 通常用一系列障碍物或者粗糙壁面来诱发 DDT。DDT 过程是一种非线性、非平衡的物理过程, 涉及激波动力学、湍流燃烧、化学反应动力学等多种效应, 其物理机制和临界条件还没有被研究清楚, 仍是一项前沿研究课题。

1881 年, Berthelot, Vieille 和 Le Chatelier 在研究火焰传播过程中发现了爆轰现象, 实验中观察到的爆轰速度比一般的火焰传播速度快很多, 因而研究者们将爆轰与爆燃划分为两种燃烧状态, 这两种状态之间的转变机制也引起了人们的研究兴趣。1883 年, Mallard 和 Le Chatelier 首次拍摄到了爆轰形成过程的照片, 照片中显示在爆轰波形成之前火焰面出现很多褶皱, 并且从爆燃向爆轰的转变非常迅速。由于实验条件的限制, 在照片中难以提炼出 DDT 过程的更多细节。1928 年, Payman 等人将旋镜式照相机应用于爆轰实验, 观察到 DDT 过程中存在复杂的波系相互作用。1935 年, Bone, Fraser 和 Wheeler 提出经过前导激波压缩的可燃气体发生局部爆炸, 导致了爆燃向爆轰的转变。1951 年, Schmidt, Steinicke 和 Neubert 利用高频频闪摄影揭示了 DDT 过程中前导激波和火焰面相互作用的更多细节。1966 年, Urtiew 和 Oppenheim 利用烟迹技术和频闪摄影照相技术系统地研究了 DDT 过程的物理机制, 他们观察到在 DDT 过程中波系和火焰的相互作用存在多种模式<sup>17</sup>。由于 DDT 过程的发生时间很短, 很难从有限的实验结果中总结规律, 阐明 DDT 的物理机制。

20 世纪后期, 计算流体力学技术 (Computational Fluid Dynamics, CFD) 在爆轰研究领域的应用推动了对 DDT 过程的研究。Zel'dovich 等人利用单步化学反应模型和 CFD 技术模拟了装有障碍物的通道中的 DDT 过程, 通过观察流场的结构特征, 提出了著名的梯度机制: 可燃气体中自燃波沿着温度梯度方向传播, 当自燃波的传播方向与压缩波相同时, 两者相互耦合形成爆轰波。在数值模拟中 Zel'dovich 利用温度梯度成功使爆轰波起爆, 从而验证了梯度机制的合理性。近十几年来的实验研究表明 DDT 过程中的温度可能不足以产生自燃波, 王成等研究发现利用单步化学反应模型计算得到的点火延迟时间比详细反应机理的结果有数量级的差别, Zel'dovich 梯度机制的适用性有待进一步讨论。Shchelkin 等人推测 DDT 过程主要与湍流有关, 因为目前诱导 DDT 的技术, 如障碍物、粗糙壁面等, 都可以看作湍流发生器, 湍流混合导致火焰加速, 使得爆燃转变为速度更高的爆轰状态, 这种观点在解释爆燃到爆轰的突变现象时会遇到一些困难。Ciccarelli 和 Lee 用详细化学反应机理开展了更精确的数值模拟, 总结出了 DDT 的 SWACER (Shock Wave Amplification by Coherent Energy Release) 机制<sup>3</sup>: 在 DDT 过程中, 激波压缩与化学反应放热两种效应相互放大, 使得激波和化学反应带耦合在一起, 形成了具有 ZND 结构的爆轰波。SWACER 机制可以有效地解释 DDT 的一些实验和数值模拟结果, 但激波和化学反应带之间的耦合机制还不清楚。姜宗林等利用环形激波聚焦模拟热点起爆过程, 分析了激波和化学反应带的相互作用机制。他们认为燃烧产生的压力波强化了前导激波, 前导激波反过来进一步提升了可燃气体的热力学状态, 这种正反馈机制导致爆燃到爆轰的转变。

本文在上述工作的基础上,在一维欧拉方程中引入膨胀项,模拟了爆轰转爆燃过程。通过分析单步总包化学反应模型和详细化学反应模型计算结果的差异和爆轰波解耦前后火焰面内压力和马赫数的分布,提出了一个气相爆轰 DDT 过程的物理模型。该模型的核心思想是:在实验室坐标系下,爆轰波面和火焰面是跨声速的,火焰面的超声速和亚声速流动会产生不同的流动行为,直接影响爆轰波的 DDT 过程。利用该模型,文中进一步给出了与 DDT 有关的一些物理现象的合理解释。

## 1 数值算法

DDT 过程涉及湍流火焰加速、激波和化学反应带相互作用等效应,存在复杂的波系结构。本研究主要关注爆燃和爆轰两种状态之间短暂的转变过程,爆轰研究表明,无论是否考虑粘性,均可以实现 DDT 过程。因此用含有膨胀项的一维 Euler 方程模拟化学当量比下氢气/空气爆轰的解耦过程,以探究 DDT 的物理机制,含有单步总包化学反应模型<sup>20</sup>的控制方程如下

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e + p)u}{\partial x} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial(\rho Z)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u Z)}{\partial x} = \dot{w} \quad (4)$$

$$e = \frac{RT}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}Cu^2 + Zq \quad (5)$$

$$\dot{w} = -K\rho Z \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (6)$$

其中  $\rho$ ,  $u$ ,  $e$ ,  $Z$ ,  $q$  分别为气体密度、气体速度、能量密度、反应物质量分数和单位质量的反应物释放的能量。 $K$  是指前系数,  $E_a$  是总包反应的活化能,  $T$  是气体温度,  $R$  是气体常数。上述方程与一维 Euler 方程的不同之处在于,动能项多了一个系数  $C$ 。 $C$  是一个膨胀系数,该系数的引入使得气体从一维向准一维膨胀,温度、压力降低,最终可能导致爆轰波解耦。

数值模拟中对流通量进行 Steger-Warming 分裂,采用频散可控耗散格式 (Dispersion Controlled Dissipation Scheme, DCD)<sup>22</sup> 进行空间离散,采用三阶 Runge-Kutta 法进行时间推进。除了单步总包化学反应模型外,研究中还使用了包含 9 种组分,19 个化学反应的基元反应模型<sup>21</sup>,以比较两种计算结果的差异。

## 2 数值模拟结果

图 1 是用单步总包化学反应模型得到的计算结果。从图中可以看出,当膨胀系数  $C$  大于 2.8 时,激波速度迅速降低到爆轰速度的一半;而膨胀系数  $C$  小于 2.7 时,激波速度的变化较小。在 2.7~2.8 之间存在一个临界膨胀系数  $C^*$ ,当膨胀系数低于该临界值时,系统保持爆轰状态,而膨胀系数高于该临界值时,发生爆轰到爆燃状态的转变。为了理解图 1 中的现象,需要解释三个问题:(1)为什么存在一个临界膨胀系数?(2)在膨胀项的影响下为什么爆轰到爆燃的转变是突变的?(3)为什么临界膨胀系数在 2.7~2.8 之间?

为了解释这些问题,进一步比较用基元反应模型得到的计算结果。从图 2 中可以看出,当膨胀系数较大时(大于 1.5),激波速度的变化行为与单步总包化学反应模型得到的结果相似;而膨胀系数较小时,经过一段时间之后爆轰才向爆燃转变,并且该转变并不是突变,因此膨胀系数的临界值以及爆轰到爆燃状态的突变现象可能与采用的化学反应模型有关。

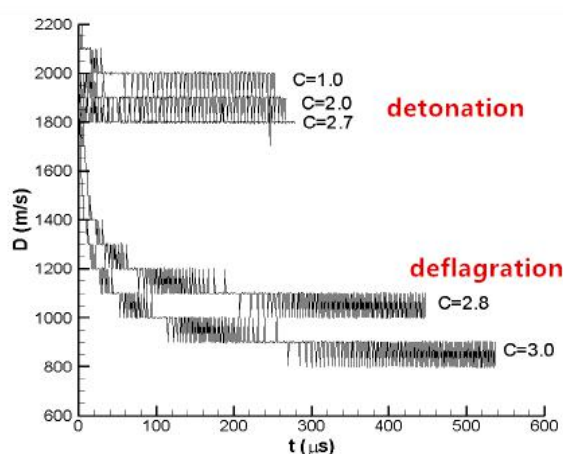


图 1. 用单步总包化学反应模型计算得到的不同的膨胀系数 $C$ 下激波速度 $D$ 随时间 $t$ 的变化<sup>4</sup>

Fig. 1 Detonation and deflagration speed under different coefficient  $C$  using one step overall reaction model<sup>4</sup>

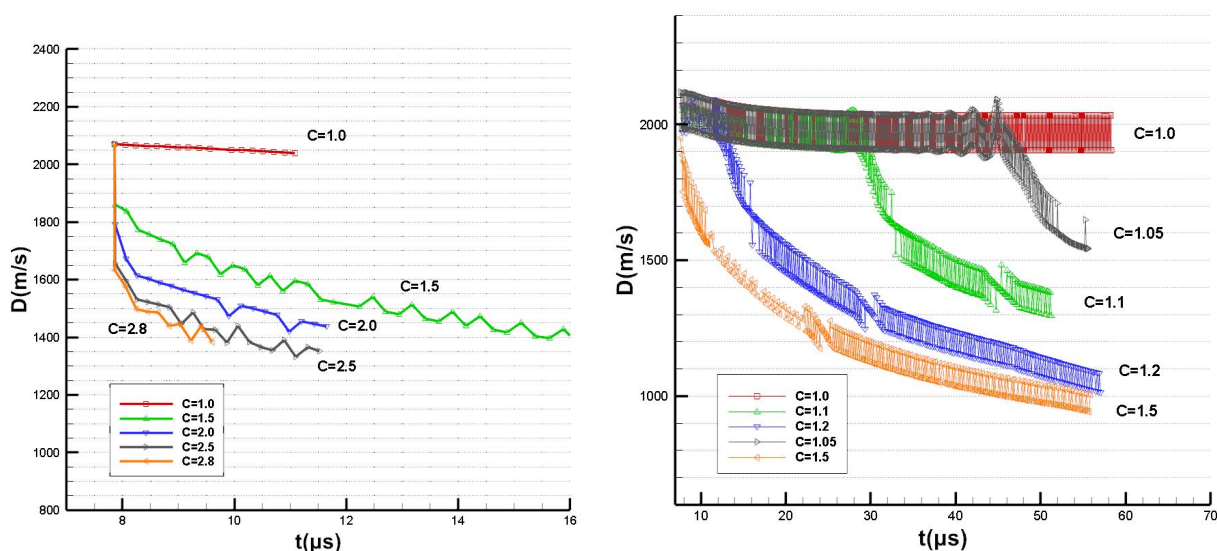


图 2. 用基元反应模型计算得到的不同的膨胀系数 $C$ 下激波速度 $D$ 随时间 $t$ 的变化, 左图中的膨胀系数 $C$ 较大, 右图中的膨胀系数 $C$ 较小

Fig. 2 Detonation and deflagration speed under larger coefficient  $C$  (left) and smaller  $C$  (right) using detailed chemical reaction model

图 3 给出了膨胀系数  $C=1.5$  的情况下, 无量纲压力、当地马赫数和  $\text{OH}$  自由基的摩尔分数的空间分布以及随时间的变化。 $\text{OH}$  自由基是氢气燃烧的链式反应中重要的链传递自由基, 其摩尔分数能够表征链式反应的强度, 在火焰面处  $\text{OH}$  自由基的摩尔分数达到最大值。从图 3 中可以看出, 在膨胀效应的影响下, 前导激波的峰值压力逐渐降低, 其压力波形变得越来越不尖锐, 同时激波波面和火焰面之间的距离随时间增加, 这些现象都表明激波和化学反应带解耦, 爆轰波转变为爆燃波。

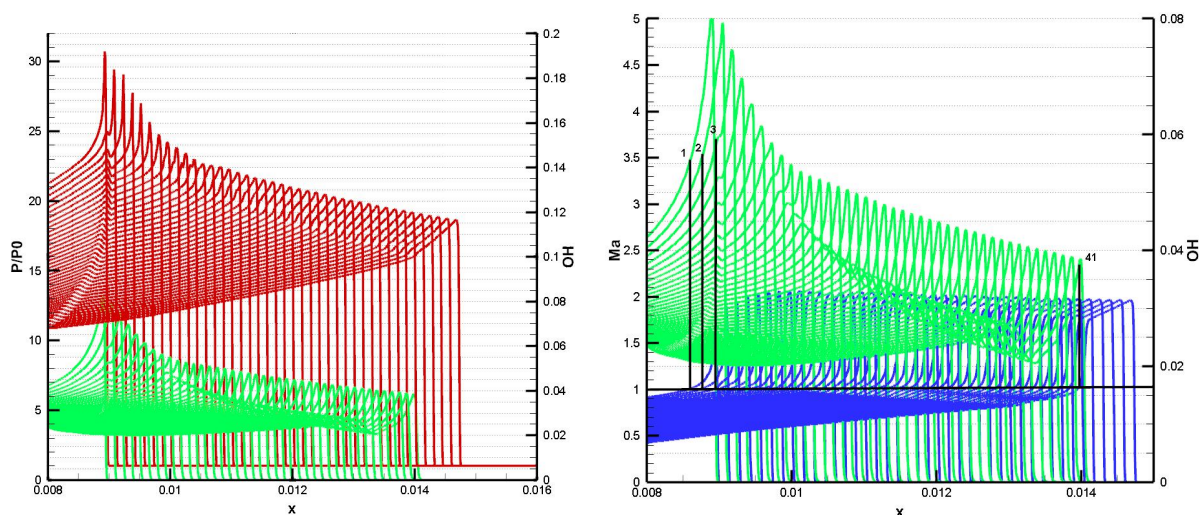


图 3. 在膨胀系数 $C=1.5$ 的情况下, 无量纲压力 $P/P_0$  (红线)、当地马赫数 $Ma$  (蓝线) 和 $OH$ 自由基的摩尔分数 (绿线) 的空间分布和随时间的变化

Fig. 3 the distribution of dimensionless pressure  $P/P_0$ (red line), local Mach number  $Ma$ (green line) and mole fraction of  $OH$ (blue line) and there change over time under  $C=1.5$

### 3 物理模型

受到上述现象的启发, 作者提出了一个气相爆轰波 DDT 过程的物理模型, 该物理模型能够说明上述单步总包化学反应模型和基元反应模型计算结果的差异, 并且可以解释与 DDT 有关的规律和一些实验和数值模拟结果。

图 4 给出了模型的示意图。在一端封闭的无限长直管道内, 从火焰面加速开始考虑 DDT 过程。一维实验室坐标系下, 当火焰面加速到未反应气体的声速附近时, 火焰面前方的压缩波累积成一道前导激波 (SW), 此时激波后的反应气体全部是亚声速的, 火焰后方由压力变化产生的稀疏波以当地声速传播, 能够影响到反应区气体, 使得火焰的燃烧处于等压燃烧状态, 燃烧产物温度较低, 燃料中的化学能没有充分转化为热量。受到稀疏波的影响, 激波和火焰面无法相互放大形成爆轰波。随着火焰面继续加速, 直到一部分燃烧产物刚好达到超声速时, 就达到了 DDT 的临界状态。此时火焰中的超声速区域不会受到稀疏波的影响, 近似处于等容燃烧状态, 燃烧速率和燃烧产物的温度相比之前的等压燃烧状态升高, 导致前导激波强度增加, 波后气体温度增加, 燃烧放热速率进一步上升, 形成正反馈。在正反馈的作用下激波速度迅速上升到 CJ 爆速, 受到燃料放热能力的限制, 激波速度无法继续稳定上升, 经过一些非平衡机制<sup>23,24</sup>最终形成了稳定传播的爆轰波。

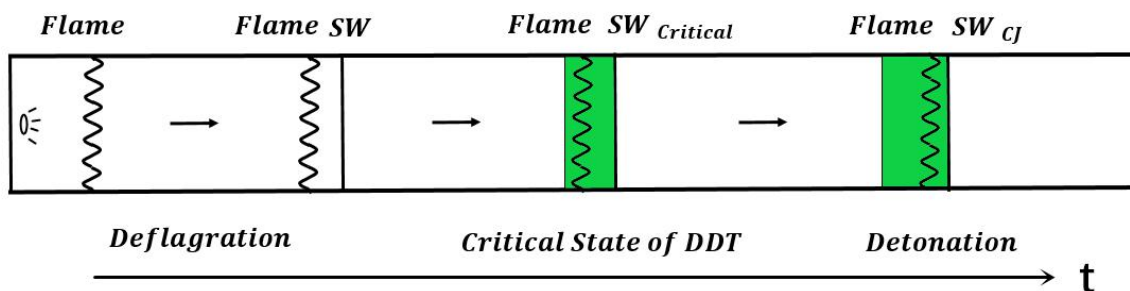


图 4. 气相爆轰波 DDT 过程的物理模型示意图, 图中绿色区域表示实验室坐标下的超声速区

Fig. 4 Schematic diagram of the new physical model of DDT. The green part represents supersonic region in lab frame

## 4 讨论

利用该模型,可以解释上述计算结果。随着膨胀系数  $C$  的引入,超声速区域的温度、压力降低,放热量减小,使得激波速度降低,激波变弱导致波后温度降低,燃烧放热量进一步减小,引发正反馈,导致前导激波和火焰面解耦,爆轰转变为爆燃。与基元反应模型相比,使用单步总包化学反应模型计算得到的点火延迟时间小很多,其放热速率更快,火焰面更尖锐,当膨胀效应较弱时,虽然化学反应放热速率降低,火焰面变宽,但整个超声速区域内的放热量影响不大,无法引起上述正反馈导致爆轰波解耦,直到膨胀效应的影响达到一定程度时,放热量才会显著降低,触发正反馈。而使用基元反应模型时,化学反应的放热区很宽,甚至延伸到了超声速区域以外,如图 5 所示,即使膨胀效应很弱,放热量降低也会触发正反馈,使得爆轰波解耦。因而用单步总包反应机理计算出的临界值是化学模型导致的,由于 DDT 过程中化学反应的特征时间与流动特征时间相比不能忽略,用基元反应模型计算得到的结果更接近实际情况。

图 3 中标出了编号为 1、2、3 和 41 的时间点处火焰中气体速度为声速的位置,从图中可以看出该位置到火焰锋面的距离逐渐减小,点 41 处到火焰面的距离几乎为 0,对应图 4 中的临界状态。图 5 给出了爆轰波解耦前后超声速区域的范围变化,由于膨胀系数很大,爆轰波在几个时间步内迅速解耦。解耦之前化学反应带与前导激波的距离很近,火焰主要位于超声速区域中,而解耦之后火焰主要位于亚声速区域中,反应放热对激波传播的影响很小。

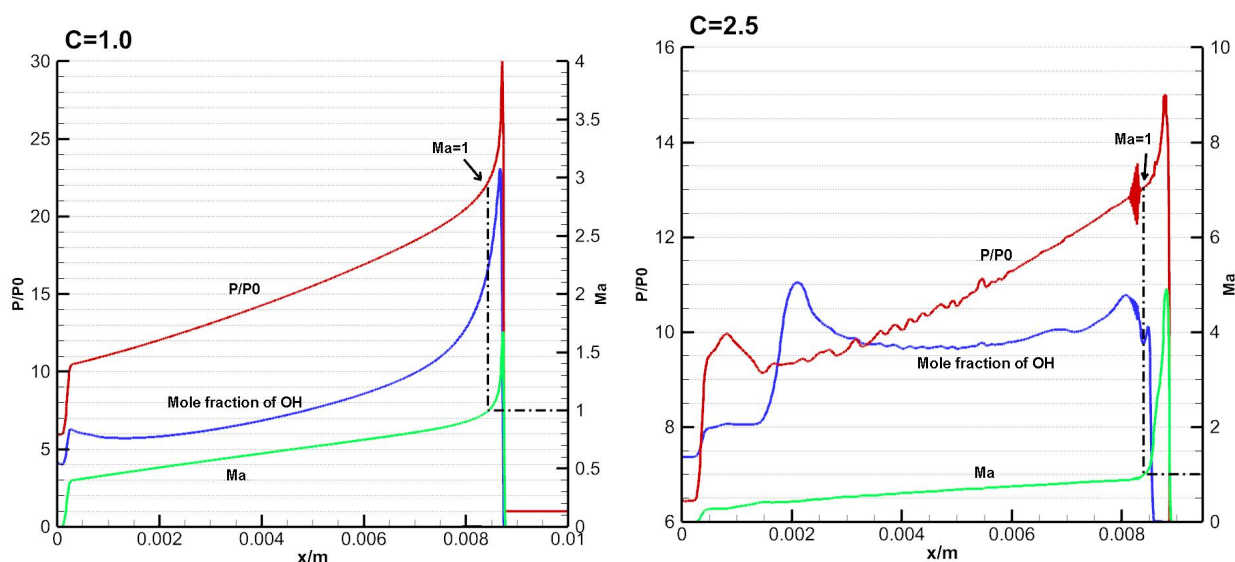


图 5.在膨胀系数 $C=2.5$ 的情况下,无量纲压力 $P/P_0$ (红线)、当地马赫数 $Ma$ (绿线)和 $OH$ 自由基的摩尔分数(蓝线)的空间分布,左右两图分别为爆轰波解耦前后的状态

Fig. 5 the distribution of dimensionless pressure  $P/P_0$ (red line), local Mach number(green line) and mole fraction of  $OH$ (blue line) before(left) and after(right) the coefficient  $C$  is introduced to the governing equation

根据该物理模型,爆燃和爆轰之间的转变主要由激波动力学和化学反应动力学控制,虽然湍流、流动不稳定性等效应会对 DDT 过程,特别是火焰的加速过程产生一定影响,但不是决定性的。与激波不同,爆燃和爆轰状态之间的转变在物理上不是一种突越现象,由于转变过程中的正反馈机制,在较大的扰动下转变时间很短,因而在实验和数值模拟上不容易分辨出转变的过程。如果施加合适的扰动,有可能使爆轰的临界状态保持一段时间,比如采用粗糙度合适的壁面<sup>6</sup>,在实验和数值模拟中都能够观察到 CJ 爆燃(CJ deflagration)状态。然而,DDT 临界状态和爆轰之间的状态无法稳定存在。

利用该物理模型可以给出 DDT 临界状态下的激波速度,该临界速度与燃料种类和化学反应机理有关,达到 DDT 的临界条件时,燃烧放热刚好能够与前导形成正反馈,意味着基元反应中最后一步放热反应的产物是跨声速的,此时的激波速度约等于燃烧产物的声速,这一结论与实验和数值模拟的结果一致。

需要指出的是,在上述数值模拟过程中通过引入膨胀项的方式使爆轰波解耦的方法可能存在争议。但

是膨胀项的引入只是触发爆轰波解耦过程的正反馈的一种技术手段。根据该物理模型，只要某种手段能够使超声速区域内燃烧放热量减小，就能够引发爆轰波的解耦。根据 Arrhenius 公式 (6)，增加反应的活化能产生的效果和通过膨胀效应降低温度相似，如果使爆轰波从催化区域向非催化区域传播，也会造成与引入膨胀效应相同的结果，如图 6 所示。

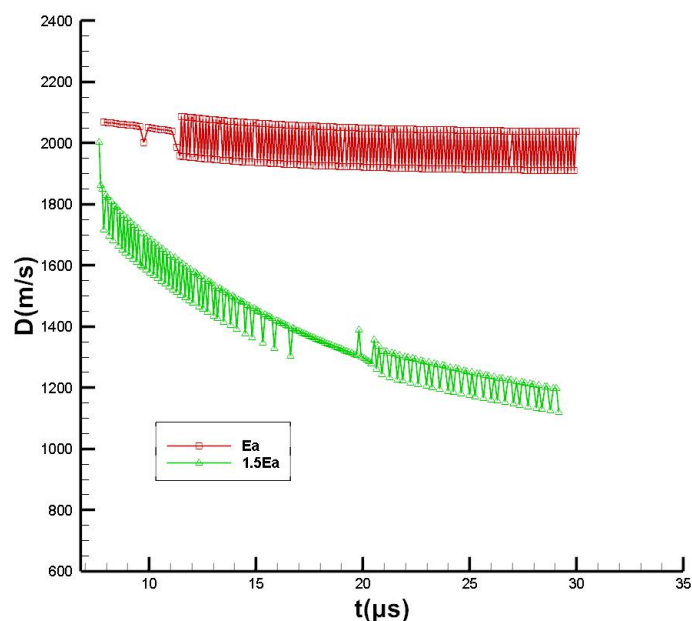


图 6. 催化区域（活化能为 $E_a$ ）和非催化区域（活化能 $E_a'=1.5E_a$ ）内前导激波速度随时间的变化

Fig. 6 Detonation and deflagration speed in catalyzed case( $E_a$ ) and uncatalyzed case( $E_a'=1.5E_a$ )

图 7 给出了二维稳定爆轰状态下波面附近的压力和马赫数分布<sup>25</sup>，从马赫数分布图中可以看出前导激波后的一部分区域都是超声速的，符合文中的物理模型。在二维、三维情况下，二维或三维效应使得爆轰现象包含更丰富的非平衡过程，如胞格结构等，如果用粗糙壁面或装有障碍物的管道来诱发 DDT 的话，流场中会包含复杂的波系结构，这些效应都会给模型的验证带来困难。

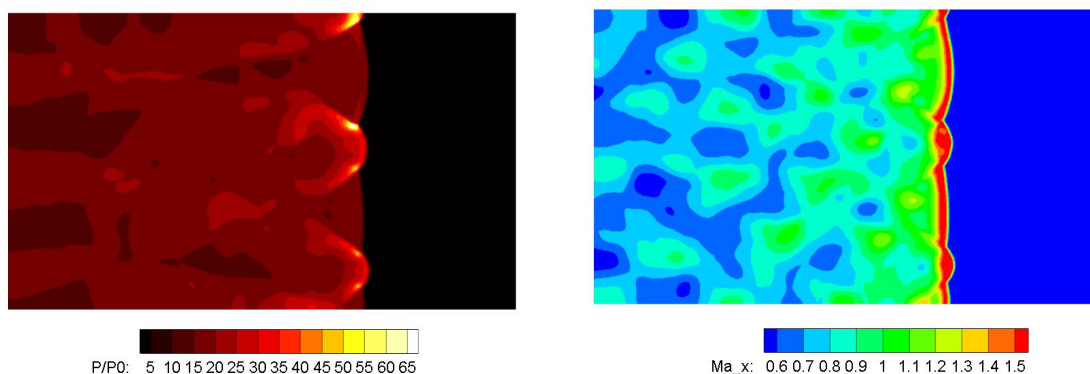


图 7. 二维稳定爆轰状态下波面附近的压力和马赫数分布

Fig. 7 Distribution of pressure (left) and Mach number (right) in two-dimensional CJ detonation

## 5 结论

本文在一维欧拉方程中引入膨胀项，模拟了化学当量比的氢气/空气混合气体爆轰转爆燃过程。通过比较单步总包化学反应模型和基元反应模型给出了计算结果的差异，同时参考 DDT 的相关实验和数值模拟结果，提出了一个气相爆轰波 DDT 过程的物理模型。该模型的主要内容是：DDT 临界状态下火焰面在实验室坐标系中是跨声速的，化学反应放热与激波压缩效应耦合在一起，相互放大形成正反馈，最终形成爆

轰波。这一模型能够解释与 DDT 有关的现象和规律, 如 CJ 爆燃、DDT 的临界速度、DDT 过程的突变现象等。在二维和三维气相爆轰中, 流场中包含更丰富的非平衡机制, 这些机制对 DDT 过程的影响有待进一步研究。

### 参考文献

- 1 Ono Ryo, Nifuku Masahara, Fujiwara Shuzo, et al. Minimum ignition energy of hydrogen-air mixture: effects of humidity and spark duration. *J. Electrostat.*, 2007, 65 (2) : 87-93
- 2 Gray JAT, Lemke M, Reiss J, et al. A compact shock-focusing geometry for detonation initiation: Experiments and adjoint-based variational data assimilation. *Combustion and Flame*, 2007, 113: 144-156
- 3 Wang Cheng, Qian Chenggeng, Liu Jiannan, et al. Influence of chemical kinetics on detonation initiating by temperature gradients in methane/air. *Combustion and Flame*, 2018, 197:400-415
- 4 Liu YunFeng, Jiang Zonglin. Study on the Mechanism of Detonation to Quasi-detonation Transition, *AIP Conference Proceedings*, 2010, 453: 1233
- 5 张薇, 刘云峰, 滕宏辉, 等. 气相爆轰波传播过程中的自点火效应. *爆炸与冲击*, 2017, 37(2): 274-282
- 6 Ciccarelli Gaby, Johansen Craig, Kellenberger Mark. High-speed flames and DDT in very rough-walled channels. *Combustion and Flame*, 2013, 160: 204-211
- 7 Teodorczyk A. Fast Deflagrations and Detonations in Obstacle-filled Channels. *Bulletin of Warsaw University of Technology*, 1995, Number 79
- 8 Wintenberger E, Shepherd JE. Thermodynamic Cycle Analysis for Propagating Detonations. *Journal of Propulsion and Power*, 2006, 22(3): 694-697
- 9 Finigan DJ, Dohm BD, Mockelman JA, Oehlschlaeger MA. Deflagration-to-detonation transition via the distributed photo ignition of carbon nanotubes suspended in fuel/oxidizer mixtures. *Combustion and Flame*, 2012, 159: 1314 - 1320
- 10 Bengoechea Sergio, Gray Joshua A.T., Reiss Julius, et al. Detonation initiation in pipes with a single obstacle for mixtures of hydrogen and oxygen-enriched air. *Combustion and Flame*, 2018, 198: 290-304
- 11 Goodwin GB, Houim RW, Oran ES. Effect of decreasing blockage ratio on DDT in small channels with obstacles. *Combustion and Flame*, 2016, 173: 16-26
- 12 Wang Luqing, Ma Honghao, Shen Zhaowu, et al. Effects of bluffbodies on the propagation behaviors of gaseous detonation. *Combustion and Flame*, 2019, 201: 118-128
- 13 Peng Han, Huang Yue, Deiterding Ralf, et al. Effects of jet in crossflow on flame acceleration and deflagration to detonation transition in methane-oxygen mixture. *Combustion and Flame*, 2018, 198: 69-80
- 14 刘云峰, 姜宗林. 分裂算法对准爆轰波数值模拟的影响. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2014, 44: 1213-1219
- 15 Gamezo Vadim N., Ogawa Takanobu, Oran Elaine S.. Flame acceleration and DDT in channels with obstacles: effect of obstacle spacing. *Combustion and Flame*, 2008, 155: 302-315
- 16 Han Wenhui, Gao Yang, Law Chuang K. Flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in micro- and macro-channels: An integrated mechanistic study. *Combustion and Flame*, 2017, 176: 285-298
- 17 Urtiew PA, Oppenheim AK. Experimental observations of the transition to detonation in an explosive gas. *Proceedings of the Royal Society A*, 1966, 295: 1440.
- 18 Oran Elaine S.. Understanding explosions-From catastrophic accidents to creation of the universe. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2015, 1:1-35
- 19 姜宗林, 滕宏辉. 气相规则胞格爆轰波起爆与传播统一框架的几个关键基础问题研究. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2012, 42: 421-435
- 20 刘云峰, 姜宗林. 详细化学反应模型中温度修正项特性研究. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2011, 41(11): 1296-1306
- 21 Burke MP, Chaos M, Ju YG, et al. Comprehensive H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> kinetic model for high-pressure combustion. *International Journal of Chemical Kinetics*, 2012, 44(7): 444-474
- 22 Jiang Zonglin. On dispersion controlled principles for non-oscillatory shock capturing schemes. *Acta Mech Sin*, 2004, 20: 1-15
- 23 段吉员, 王建, 何智. 气相DDT中过爆轰现象产生条件的实验研究. *高压物理学报*, 2010, 24(04): 305-310
- 24 胡浩, 庞士磊, 况青松. 可燃气体爆燃转爆轰问题的研究. *合肥工业大学学报(自然科学版)*, 2005, (03):311-314
- 25 张文硕, 刘云峰, 姜宗林. 气相爆轰胞格的时空统计特性研究. 第十八届全国激波与激波管学术会议, 北京市, 2018年6月14-18
- 26 程关兵, 王国大, 黄燕晓. 氢气爆燃转爆轰特性试验研究. *中国安全科学学报*, 2016, 26(12): 64-68
- 27 赵永耀. 管道内火焰加速及爆燃转爆轰的高精度大涡模拟. 2015中国力学大会, 上海市, 2015年8月15-18
- 28 陈默, 白春华, 刘庆明. 铝粉-空气混合物爆燃转爆轰过程及爆轰波结构. *高压物理学报*, 2012, 26(04): 426-432
- 29 姜宗林. 可燃气体爆燃转爆轰过程的机理探索. 中国力学学会庆祝中国力学学会成立50周年暨中国力学学会学术大会, 北京市, 2007年

# A NEW PHYSICAL MODEL OF DDT PROCESS IN GASEOUS DETONATION

Zhang Wenshuo<sup>1,2</sup>, Liu Yunfeng<sup>1,2</sup>, Jiang Zonglin<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>(*Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

<sup>2</sup>(*School of Engineering Science, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)

**Abstract :** Deflagration to detonation transition (DDT) process is a non-equilibrium and non-linear physical process which involves shock wave mechanics, thermodynamics, chemical reaction kinetics, etc. The study on DDT process has been conducted for over on hundred years. Now the physical mechanism of DDT is still under discussion. Clarifying the physical mechanism of DDT process and predicting the critical condition of DDT accurately is of great significance to understand detonation phenomena and to prevent explosion accidents. In this paper, an expansion coefficient is introduced to one-dimensional Euler equation to simulate the detonation-to-deflagration transition process of stoichiometric hydrogen /air mixture. By comparing the numerical results given by one step overall reaction model and detailed chemical reaction model and referring to various results of experiment and numerical simulation, the authors propose a one-dimensional model to describe DDT process. The main idea of the model is that the detonation wave surface and the flame surface are transonic in the laboratory coordinate system under the critical state of DDT. Then the DDT process is realized by positive feedback of heat release from chemical reaction and shock compression. This model can explain many phenomena related to DDT process, such as CJ deflagration, the critical velocity of DDT, the abrupt transition, etc.

**Key words:** DDT, gaseous detonation, physical model