

## ОЦЕНКА КРИТИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ ПЕРЕХОДА ГОРЕНИЯ В ДЕТОНАЦИЮ

А. А. Васильев

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, gasdet@hydro.nsc.ru

Предложена оценка критического числа Маха ударной волны, при которой возможен переход горения в детонацию (ПГД): для расходящихся волн —  $M_{\min} \approx 0.56M_0$ ; для волн, распространяющихся в прямолинейной трубе постоянного сечения, —  $M_{\min} \approx 0.33M_0$  ( $M_0$  — число Маха идеальной детонационной волны Чепмена — Жуге). При  $M > M_{\min}$  реализуется режим ПГД, ниже — только режимы ламинарного или турбулентного горения без ПГД. Основная идея оценки — равновероятная возможность перехода из сжатого состояния исходной смеси как на детонационную, так и на дефлаграционную ветвь адиабаты продуктов реакции (относительно исходного состояния горючей смеси).

Ключевые слова: переход горения в детонацию, критерий.

### ВВЕДЕНИЕ

Согласно современной классификации возбуждение горючей смеси достигается тремя основными способами [1]:

— слабое инициирование (воспламенение), когда возбуждается только ламинарное горение со скоростями распространения на уровне десятков сантиметров в секунду;

— сильное (прямое) инициирование, когда самоподдерживающаяся детонационная волна (ДВ) формируется в непосредственной близости от инициатора и затем распространяется по смеси со скоростью на уровне нескольких километров в секунду;

— промежуточный случай, когда смесь только поджигается на начальном этапе, а затем фронт пламени ускоряется в силу естественных или искусственных причин до скоростей (видимых) на уровне сотни метров в секунду. При определенных условиях в дальнейшем может даже реализоваться переход горения в детонацию (ПГД).

В последнем случае принципиально важным для ПГД является тип симметрии: расходящиеся волны (цилиндрические или сферические) или квазиплоские (распространение в прямолинейной трубе). В расходящихся волнах без искусственного воздействия на волну основным механизмом ускорения является

автотурбулизация пламени. Вопрос о возможности самостоятельного ПГД в расходящихся волнах до сих пор является дискуссионным и не имеет четкого экспериментального подтверждения. В трубах же наряду с автотурбулизацией пламени весьма важную роль играют процессы взаимодействия с боковыми стенками и принципиальная возможность ПГД хорошо известна (особенно для активных топливно-кислородных смесей). Несмотря на установление факта ПГД сами данные о ПГД в трубах весьма противоречивы, особенно для топливно-воздушных смесей. Цель данной работы — определить количественно условие реализации ПГД, причем как для расходящихся волн, так и для волн в прямолинейной трубе.

Эффект возбуждения горения или детонации обычно носит «пороговый» характер («да» — «нет») для любого инициатора. Такой же пороговый характер присущ и ПГД. Минимальная энергия, обеспечивающая 100 %-е инициирование при данных условиях, традиционно называется критической энергией. Обычно критическая энергия характеризуется некоторой кривой, проведенной по граничным значениям энергий в области «да» — «нет» на графике энергии инициирования в зависимости от каких-либо параметров смеси (начального давления или температуры, длительности разряда, межэлектродного расстояния и т. д.). Например, на рис. 1 представлены зависимости критических энергий возбуждения сферического пламени (штриховая кривая II и вышележащая область) и прямого инициирования сфери-

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 05-01-00129), ведущей научной школы «Механика ударных и детонационных процессов» (НШ-2073.2003.1) и INTAS (грант 03-51-3332).

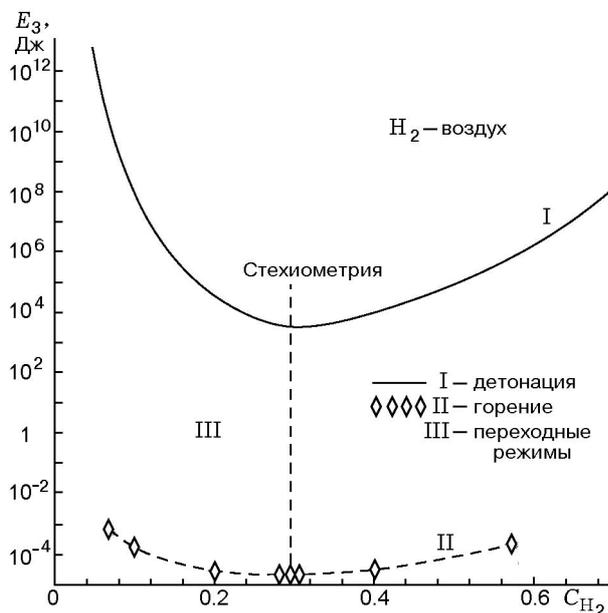


Рис. 1

ческой детонации (сплошная линия I и область выше нее) для смесей водород — воздух в зависимости от мольной доли водорода. Вертикальная штриховая прямая соответствует стехиометрическому соотношению водорода с воздухом. Область III между линиями I и II соответствует возбуждению режимов, промежуточных между низкоскоростным ламинарным горением и высокоскоростной самоподдерживающейся детонацией. Где-то между линиями I и II должна лежать линия, являющаяся границей осуществления режимов ПГД.

Критическая энергия зажигания  $E_{flame}$  (во всяком случае, при искровом воспламенении) традиционно выступает как основной параметр пожароопасности смеси — первый случай вышеприведенной классификации. Во втором случае критическая энергия инициирования детонации  $E_*$  идеального с точки зрения пространственно-временных характеристик инициатора служит мерой детонационной опасности смесей: чем меньше  $E_*$ , тем более опасна смесь. Умение рассчитывать критические энергии зажигания и инициирования детонации чрезвычайно важно с точки зрения безопасности. Также важен и количественный критерий ПГД (в силу многопараметричности данного процесса).

Идеальность инициатора понимается в следующем смысле. Каждой смеси при данных условиях (давление, температура, состав) при-

суци некоторые характерные пространственный и временной масштабы  $r_*$  и  $t_*$ . В то же время при данных условиях взрывчатая смесь поглощает от инициатора в течение конечного промежутка времени  $t_0$  в конечной области пространства  $V_0 = f(r)$  некоторое количество энергии  $E_\nu$  (часть  $\eta$  от первоначально запасенной в инициаторе энергии  $E_0$ ):

$$E_\nu = \int_0^{t_0} \int_0^{V_0} \varepsilon(t, V) dt dV = \eta E_0,$$

$\varepsilon(r, t)$  — функция, описывающая пространственно-временной закон вводимой энергии,  $\nu$  — размерность задачи ( $\nu = 1, 2, 3$  для плоской, цилиндрической и сферической симметрии соответственно). В общем случае  $E_\nu$  является сложной функцией от характерных масштабов смеси и инициатора, точнее, от их соотношения. И лишь при условиях  $t_0 \leq t_*$  и  $r_0 \leq r_*$  возбуждение многофронтной ДВ определяется только величиной  $E_*$ . Эти условия и представляют для данной смеси критерии «мгновенности» и «точности» используемого инициатора.

Следует заметить, что с формальной математической точки зрения вышеприведенное интегральное равенство представляет типичный функционал в вариационной задаче о минимизации энергии  $E_\nu$ . При обоюдном влиянии пространственного и временного факторов энерговода требование минимизации вводимой энергии до величины  $E_{\min}$  одновременно сводится к минимизации плотности мощности до  $\varepsilon_{\min} = \varepsilon(r^*, t^*)$ . При учете только временного фактора ( $E_t$ ) одновременно с  $E_{\min}$  требуется оптимизировать мощность энерговода  $\varepsilon_{\min} = \varepsilon(t^*)$ . Влияние пространственной компоненты энерговода ( $E_r$ ) должно сводиться к оптимизации плотности вводимой энергии  $\varepsilon_{\min} = \varepsilon(r^*)$  одновременно с  $E_{\min}$ .

Экспериментальные исследования показали, что влияние пространственного фактора энерговода отличается от временного фактора: эффективность инициирования может быть увеличена за счет оптимального пространственного распределения вводимой энергии.

Знание пространственно-временных характеристик энерговыделения любого индивидуального инициатора необходимо для корректного экспериментального определения критической энергии и ее оптимизации.

## ПГД И ЕГО ОСОБЕННОСТИ

В задачах взрывоопасности горючих систем чрезвычайно важно достоверное моделирование всего сценария развития взрыва: зажигание смеси и возникновение низкоскоростного ламинарного пламени; ускорение горения из-за естественной или искусственной турбулизации; последующее формирование волн сжатия расширяющимся пламенем и образование головной ударной волны (УВ); усиление УВ; возникновение в сжатой смеси адиабатической вспышки, приводящей при благоприятных условиях к формированию ДВ сначала в области сжатого и нагретого газа, а затем, после догона детонационной волной головного ударного скачка, к распространению ДВ по исходной смеси.

За относительной простотой изложенной выше последовательности перехода горения в детонацию в действительности скрывается многостадийность ПГД с большим количеством физических механизмов для каждой отдельно взятой стадии, начиная от механизмов теплопередачи и диффузии при зажигании смеси и распространении ламинарного пламени с последующим включением механизмов развития и затухания турбулентности, нарастания неустойчивых гармоник и т. д. Важны также кинетические аспекты воспламенения (включая добавки с ингибирующими или промотирующими компонентами, в том числе ионизируемыми).

Одна из важнейших проблем — формирование головной УВ из слабых волн сжатия и ее усиление от акустического уровня до уровня мощной УВ, приводящей к формированию ДВ. Исторически первой была гипотеза о мгновенном возникновении детонации в точке слияния слабых волн сжатия, генерируемых расширяющимся фронтом ламинарного или турбулентного пламени [2]. На сегодняшний день чаще всего при численном моделировании применяется гипотеза о «градиентном» ускорении [3, 4]. Суть гипотезы заключается в том, что усиление головной волны может осуществляться при строго согласованном энерговыделении смеси, в отсутствие согласования усиления нет. В системе должны возникнуть вполне определенные градиенты основных параметров (давления, температуры, плотности, задержки воспламенения и т. д.), чтобы возник «эффект сцепления» кинетических и газодинамических характерных параметров, при котором возмо-

жен эффект усиления головной волны. Следует отметить, что «градиентный механизм» до сих пор не имеет ни одного достоверного экспериментального подтверждения и, по мнению автора, представляет красивую математическую гипотезу, претендующую на объяснение реальных процессов в нестационарных течениях. Автору не известна детальная расчетная работа, где была бы полностью прослежена динамика усиления акустической волны сжатия до мощной УВ, присущей самоподдерживающейся детонации. Обычно при моделировании зажигания смеси задается начальная область с температурой, превышающей начальную, а для сокращения времени расчета последующей динамики процесса эта температура выбирается достаточно большой (часто равной половине температуры продуктов сгорания, что в несколько раз превышает температуру воспламенения). При столь высоких температурных градиентах расширение продуктов сгорания с самого начала приводит к формированию волн сжатия заметной амплитуды. Чаще всего в расчетах динамика усиления заменяется мгновенным взрывом некоторого объема горючей смеси, из которого затем быстро формируется ДВ. Кажущееся решение проблемы ПГД не имеет ничего общего с реальными физическими механизмами ускорения пламени (автотурбулизация фронта горения, переход ламинарного горения в турбулентное, усиление волн сжатия, неустойчивость УВ и фронта горения).

Хотя для обычных условий отдельные стадии и их механизмы изучены достаточно подробно (включая газодинамические аспекты — возникновение направленного движения первоначально неподвижной смеси), для условий ПГД с огромным диапазоном изменения основных параметров смеси все еще испытывается острый недостаток данных (например, о нормальной скорости горения в потоке с повышенными давлениями и температурами, типичными для условий ПГД). Потому не удивительно, что для такого интересного явления, как ПГД, количественный критерий перехода — произойдет или нет — до сих пор не сформулирован. Подобный критерий необходим при различного рода практических оценках взрывоопасности горючих систем.

На плоскости ( $P-V$ ) исходное и конечные состояния горючей смеси традиционно изображаются с помощью ударной адиабаты (химическая реакция не происходит) и адиабаты

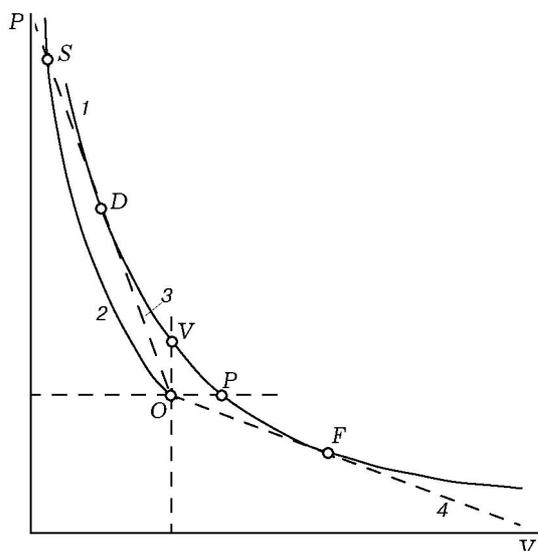


Рис. 2

продуктов реакции, на которых есть несколько важных точек (рис. 2): точка  $O$  — начальное состояние; линии 2 и 1 — ударная адиабата и адиабата продуктов реакции с двумя ветвями — детонационной (выше  $O$ ) и дефлаграционной (ниже  $O$ ); штриховые прямые 3 и 4 — касательные к детонационной и дефлаграционной ветвям, проведенные из точки  $O$ ; точка  $D$  соответствует параметрам детонации — скорости распространения  $D_D$ , точка  $F$  — параметрам дефлаграции с максимальной скоростью  $D_F$ , точка  $S$  — параметрам химпика ДВ. Конечное состояние продуктов сгорания в режиме постоянного давления обозначено  $P$ , а при мгновенном сгорании в бомбе — точкой  $V$ . Состояния в квадранте  $VO P$  запрещены для обычных сред, поскольку в этой области расширение вещества должно приводить к увеличению давления.

При поджигании смеси скорость распространения пламени (нормальная скорость горения) много меньше скорости  $D_F$ , потому конечное состояние продуктов сгорания во фронте ламинарного пламени с большой точностью соответствует режиму сгорания при постоянном давлении, т. е. точке  $P$ .

В данной работе предложен подход к формулировке критерия ПГД на основе анализа ( $P$ - $V$ )-диаграмм.

### КРИТЕРИЙ ПГД

Волны сжатия приводят к тому, что начальное состояние перед фронтом пламени на-

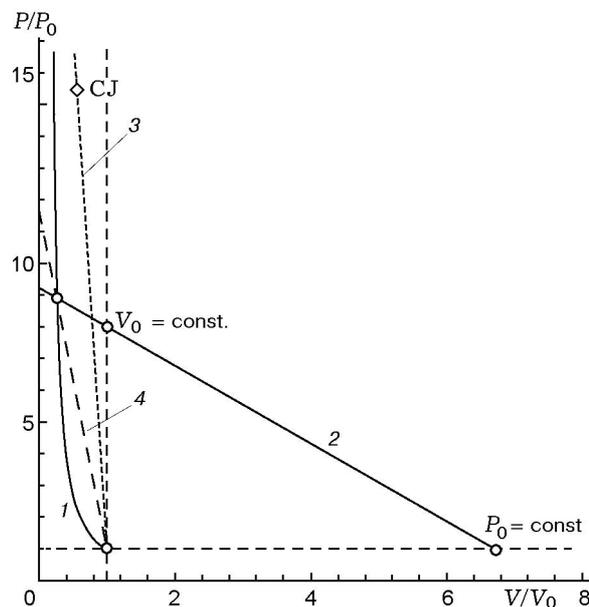


Рис. 3

чинает смещаться вверх вдоль ударной адиабаты 2 (точнее — вдоль адиабаты Пуассона при малых амплитудах волны), а конечное состояние либо практически не меняется (точка  $P$ ), либо начинает сдвигаться вниз вдоль дефлаграционной ветви адиабаты 1. Прямая, связывающая эти новые состояния, из практически горизонтальной для ламинарного пламени превращается в наклонную с возрастающим углом наклона. При возрастании интенсивности УВ наступит момент, когда эта прямая достигнет точки  $V$ , которая по смыслу является минимально близкой точкой перехода смеси из исходного состояния  $O$  на адиабату 1 конечных продуктов реакции. Именно при данной ситуации для состояния на ударной адиабате возникают два решения: одно соответствует режиму горения с конечным состоянием на дефлаграционной ветви, второе — режиму детонации с состоянием на детонационной ветви. Подобная ситуация принимается в данной работе за необходимое условие ПГД.

Запишем уравнение ударной адиабаты (линия 1 на рис. 3):

$$\pi_1 = \frac{2\gamma}{\gamma + 1} \frac{2\sigma}{(\gamma + 1) - (\gamma - 1)\sigma} - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}$$

и уравнение прямой (линия 2 на рис. 3), проходящей через точки состояний мгновенного сгорания в постоянном объеме ( $V = V_0 = \text{const}$ ) и горения при постоянном давлении ( $P = P_0 = \text{const}$ ):

Смесь	$c_0$ , м/с	$P_{CJ}$	$\sigma_{CJ}$	$P_V$	$\sigma_P$	$P_{def}$	$\sigma_{def}$	$\pi^*$	$M_{inc}$	$M_{ref}$	$M_0$
$C_2H_2 + 2.5O_2$	330	33.83	1.84	17.07	0.07	0.48	0.036	18.2	3.95	2.1	7.34
$C_2H_2 + \text{воздух}$ (стехиометрия)	347	19.11	1.82	9.77	0.12	0.48	0.062	10.6	3.05	1.8	5.38
$C_2H_4 + 3O_2$	328	33.43	1.85	16.87	0.07	0.48	0.036	17.8	—	—	7.24
$C_2H_4 + \text{воздух}$ (стехиометрия)	347	18.35	1.81	9.38	0.12	0.48	0.064	10.1	2.95	1.8	5.26
$2H_2 + O_2$	537	18.79	1.84	9.59	0.12	0.49	0.062	10.4	3	1.8	5.28
$H_2 + \text{воздух}$ (стехиометрия)	409	15.58	1.8	8	0.15	0.48	0.076	9	2.8	1.75	4.82
$CH_4 + 2O_2$	355	29.32	1.85	14.84	0.08	0.49	0.04	15.8	3.65	2.05	6.73
$CH_4 + \text{воздух}$ (стехиометрия)	354	17.17	1.81	8.79	0.13	0.47	0.069	9.6	2.9	1.75	5.09

$$\pi_{II} = \pi_V - \frac{\pi_V - 1}{1/\sigma_P - 1} \left( \frac{1}{\sigma} - 1 \right),$$

здесь  $\pi = P/P_0$  и  $\sigma = \rho/\rho_0$ ,  $\gamma$  — показатель адиабаты. Совместное решение определяет точку пересечения этих линий. Через данную точку из начального состояния можно попасть с помощью УВ, амплитуда которой определяется соотношением

$$M_{\min}^2 = \frac{(\gamma + 1)\pi^* + (\gamma - 1)}{2\gamma} \approx \frac{\gamma + 1}{2\gamma} \pi_{V_0},$$

поскольку  $\pi^* \approx \pi_V$ . Последнее соотношение позволяет оценить минимальное число Маха УВ, которая переводит начальное состояние смеси в такое сжатое состояние (линия 4 на рис. 3), из которого исходная смесь может равновероятно превратиться в продукты либо во фронте пламени, либо в волне детонации (линия 3 на рис. 3 — прямая Михельсона из начального состояния в состояние Чепмена — Жуге). По сути, это и есть условие возможности ПГД, и именно ПГД для расширяющихся волн (см. выше).

Для волн, распространяющихся в прямой трубе, состояние в точке пересечения  $\pi^*$  может реализоваться при отражении от стенки, чему будет соответствовать другая величина минимальной амплитуда УВ для ПГД в трубе.

В таблице представлены данные для ряда известных смесей: скорость звука в исходной смеси, давление  $P$  и степень сжатия  $\sigma$  для типичных процессов горения и детонации (идентификация — по нижним индексам), значения минимального числа Маха для ПГД за падающей ( $M_{inc}$ ) и отраженной ( $M_{ref}$ ) волнами. Для

всех смесей с высокой точностью для расходящихся волн  $M_{\min} \approx 0.56M_0$ , а для ПГД в трубе  $M_{\min} \approx 0.33M_0$ , здесь  $M_0$  — число Маха идеальной волны Чепмена — Жуге. Расчеты параметров смеси выполнены с помощью компьютерной программы «БЕЗОПАСНОСТЬ» [5, 6].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе идеи о равновероятной возможности перехода из сжатого состояния исходной смеси как на детонационную, так и на дефлаграционную ветви адиабаты продуктов реакции (относительно исходного состояния горючей смеси) предложена оценка для критического числа Маха ударной волны, обеспечивающей возможность перехода горения в детонацию: для расходящихся волн —  $M_{\min} \approx 0.56M_0$ ; для волн, распространяющихся в прямой трубе постоянного сечения, —  $M_{\min} \approx 0.33M_0$ . При  $M > M_{\min}$  реализуется ПГД, ниже — только режимы ламинарного или турбулентного горения без ПГД.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Васильев А. А. Околокритические режимы газовой детонации: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Новосибирск, 1995.
2. Зельдович Я. Б., Компанец А. С. Теория детонации. М.: Изд-во техн.-теорет. лит., 1955.
3. Зельдович Я. Б. Флуктуации периода индукции разветвленной цепной реакции // Докл. АН СССР. 1981. Т. 257, № 5. С. 1173–1174.
4. Гельфанд Б. Е., Фролов С. М., Цыганов С. А. Критерий возбуждения ударных и детонационных волн в реагирующей среде // Хим. физика. 1989. Т. 8, № 5. С. 655–666.

5. **Васильев А. А., Валишев А. И., Васильев В. А., Панфилова Л. В.** Характеристики горения и детонации гидразина и его метилпроизводных // Физика горения и взрыва. 2000. Т. 36, № 3. С. 81–96.
6. **Васильев А. А.** Параметры ударных волн в газах: В 2 частях. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1990.

*Поступила в редакцию 9/IX 2005 г.*

---