

7. Боуден Ф. П., Иоффе А. Д. Возбуждение и развитие взрыва в твердых и жидких веществах.— М.: ИЛ, 1955.
8. Баум Ф. М. и др. Термостойкие взрывчатые вещества и их действие в глубоких скважинах.— М.: Недра, 1969.
9. Таблицы физических величин/Под ред. И. К. Кикоина.— М.: Атомиздат, 1976.
10. Воскобойников И. М., Анин А. Я. Измерение температуры детонационного фронта взрывчатых веществ // Докл. АН СССР.— 1960.— 130. № 4.— С. 804—806.
11. Исследование ракетных двигателей на твердом топливе/Под ред. Саммерфилда.— М.: ИЛ, 1963.
12. Беляков Г. В. Ударная деформация зернистых сред // Докл. АН СССР.— 1974.— 218, № 6.— С. 1280—1282.
13. Беляков Г. В., Родионов В. И., Самосадный В. П. О разогреве пористого вещества при ударном сжатии // ФГВ.— 1977.— 13, № 4.— С. 614—619.
14. Баум Ф. А., Станюкович К. П., Шехтер Б. И. Физика взрыва.— М.: Физматгиз, 1959.
15. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений.— М.: Наука, 1966.

г. Москва

Поступила в редакцию 5/VII 1991,
после доработки — 25/XII 1991

УДК 534.222.2

Ю. Н. Шебеко, А. Я. Корольченко, С. Г. Цариченко

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ДВ В ГАЗОВОМ СЛОЕ С ДЕТАЛЬНЫМ УЧЕТОМ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

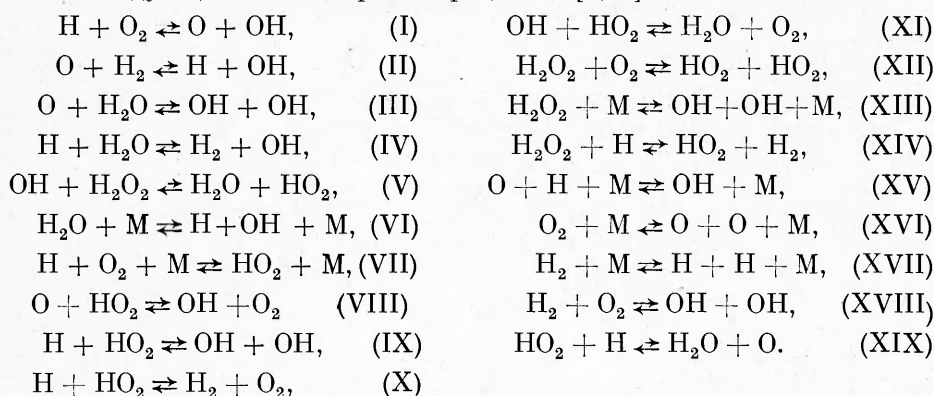
Проведено численное моделирование распространения детонационной волны в газовом слое гремучей смеси ($2\text{H}_2 + \text{O}_2$), граничащем с одной стороны с твердой нетеплопроводной стенкой, а с другой — с воздухом. Учтено 19 прямых и 19 обратных элементарных химических актов. Обнаружено определяющее влияние константы скорости реакции $\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{O}$ на величину критической толщины газового слоя.

Исследование распространения детонационной волны (ДВ) в газовом слое конечной толщины представляет как теоретический интерес в связи с изучением предельных условий детонации, так и практический интерес с точки зрения обеспечения взрывобезопасности технологических процессов. Конкуренция нагрева горючей смеси в ударной волне (УВ) и охлаждения ее за счет боковой разгрузки приводит к существованию критической толщины газового слоя $\delta_{\text{кр}}$ по отношению к стационарному или квазистационарному (пульсирующий режим) распространению детонационной волны. Проблеме экспериментального и расчетного определения $\delta_{\text{кр}}$ для газовых смесей посвящены работы [1—6]. Опытное определение дает наиболее надежные значения критической толщины газового слоя, однако детальное понимание околопредельных явлений при детонации свободных зарядов вряд ли может быть достигнуто без развития математических моделей. Ряд упомянутых выше работ рассматривает проблему моделирования распространения детонации в газовых объемах конечной толщины [2—4], однако в них наряду с детальным учетом газодинамических процессов химическая реакция описывается в упрощенном аррениусовском виде, что может привести к определенным ошибкам в структуре и характеристиках околопредельных детонационных волн.

В связи с этим, в настоящей работе ставится задача численного моделирования процесса распространения детонационной волны в газовом слое с детальным учетом кинетики химической реакции на примере гремучего газа ($2\text{H}_2 + \text{O}_2$).

Основные двумерные уравнения газовой динамики в лагранжевом описании и методика их решения подробно изложены в работах [2—4].

Тепловыделение в химической реакции описывали как результат протекания следующих элементарных процессов [7, 8]:



Константы скоростей реакций (I) — (XIX) взяты из [7, 8] и приведены в таблице. Константы скоростей реакций представлены в виде $k = A \cdot T^n \exp(-T_*/T)$, где величины T_* выражены в К, A — в $\text{см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$ или $\text{см}/(\text{моль}^2 \cdot \text{с})$ для бимолекулярных и тримолекулярных реакций соответственно. Как показано в работе [7], кинетическая схема с приведенными в таблице константами скоростей позволяет с удовлетворительной точностью предсказывать пределы детонации, критическую энергию прямого инициирования, критический диаметр. Расчеты проводили на ЭВМ ЕС-1055. Время счета одного варианта ~ 15 ч.

Расчитанные продольные и поперечные профили основных гидродинамических параметров газовой смеси (давление, температура, плотность) и концентрации радикалов отличаются весьма крутым падением в сторону непрореагировавшей смеси, при этом изменение любого из указанных выше параметров от минимального до максимального значения реализуется на расстоянии $\sim 0,01-0,02$ см. Максимальные величины объемных концентраций радикалов H, OH, O составляют несколько процентов значения [H], [OH], [O], практически равновесные, в отличие от водородовоздушных пламен, где максимальные концентрации указанных радикалов в несколько раз превышают равновесные.

Номер реакции	Прямой процесс			Обратный процесс		
	lg A	n	T_*	lg A	n	T_*
I	14,27	0	8490	13,17	0	340
II	10,26	1	4490	9,92	1	3510
III	13,54	0	9250	12,50	0	560
IV	14,00	0	10250	13,34	0	2600
V	13,00	0	910	13,45	0	16550
VI	16,35	0	53000	14,15	-2	0
VII	15,52	0	-500	15,36	0	23200
VIII	13,70	0	500	13,82	0	28600
IX	14,40	0	960	13,08	0	20200
X	13,40	0	350	13,74	0	29200
XI	13,70	0	500	14,80	0	37300
XII	13,60	0	21550	13,00	0	500
XIII	17,09	0	23000	14,97	0	2560
XIV	12,24	0	1890	11,86	0	9950
XV	16,00	0	0	19,90	-1	52300
XVI	15,74	0	58100	15,67	-0,28	0
XVII	14,34	0	48500	15,48	0	0
XVIII	12,40	0	19500	10,91	0	10000
XIX	13,00	0	0	13,21	0	27500

Расчеты показали, что для приведенной выше кинетической схемы с указанными константами скоростей элементарных реакций происходит затухание детонационной волны при толщинах газового слоя < 19 см. В то же время если увеличить величину k_1 в 2 раза, то $\delta_{кр} = 7 \div 9$ см (для газового слоя, граничащего с одной стороны с твердой нетеплопроводной стенкой). Для сравнения отметим, что результаты расчетов [4], использующих аррениусовскую аппроксимацию химической реакции, оптимизированную с точки зрения правильной величины вычисленной скорости детонационной волны, дают $\delta_{кр} = 1,35 \div 1,80$ см, в то время как для смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ экспериментальное значение [5] $\delta_{кр} \approx 4,5$ см.

Проведено варьирование константы скорости реакции зарождения цепей (реакция XVIII). Оказалось, что увеличение или уменьшение величины k_{18} в 2 раза практически не отражается на результатах расчета.

Из приведенных расчетов следует, что критическая толщина газового слоя довольно чувствительна к особенностям кинетики химических реакций, в частности, к константе скорости реакции разветвления $\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{O}$. Поскольку эта реакция — лимитирующая в периоде индукции для гремучего газа, то напрашивается вывод о том, что именно индукционные процессы, а не процессы энерговыделения ответственны за срывные явления в детонационной волне.

В работе [7] удалось достичь достаточно хорошего совпадения результатов расчета и эксперимента для ряда критических параметров детонации. Там использована известная классическая модель одномерной детонации Зельдовича — Неймана — Деринга. При этом в [7] опущены некоторые потенциально важные эффекты, возникающие в результате кинетико-газодинамических взаимодействий, и для исчерпывающей модели детонации необходимы, по крайней мере, два пространственных измерения [7, с. 69]. В настоящей работе как кинетические, так и газодинамические факторы учитываются достаточно полно. В связи с этим, вероятно, и проявляется более высокая чувствительность результатов расчетов к величине константы скорости реакции $\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{O}$. В будущем представляется целесообразным для решения обратной задачи найти значение k_1 , с помощью которого удастся получить правильную величину $\delta_{кр}$. С использованием k_1 представляется возможным рассчитывать критические толщины газовых слоев для большого числа водородсодержащих смесей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Васильев А. А. О критическом диаметре детонации газовых смесей // ФГВ.— 1982.— 18. № 3.— С. 98—104.
2. Иванов М. Ф., Фортвов В. Е., Борисов А. А. Численное моделирование развития детонации в газовых объемах конечной толщины // Там же.— 1981.— 17, № 3.— С. 108—116.
3. Иванов М. Ф., Шебеко Ю. П., Корольченко А. Я. Численное моделирование процесса распространения детонации в газовом слое гремучей смеси, разбавленной азотом // Там же.— 1984.— 20. № 2.— С. 118—121.
4. Шебеко Ю. П., Корольченко А. Я., Еременко О. Я. Расчет критической толщины газового слоя по отношению к распространению детонационной волны // Там же.— 1987.— 23. № 6.— С. 89—91.
5. Васильев А. А., Зак Д. В. Детонация газовых струй // Там же.— 1986.— 22. № 4.— С. 82—88.
6. Васильев А. А. Околопредельные режимы газовой детонации // Там же.— 1987.— 23, № 3.— С. 121—126.
7. Вестбрук Ч., Уртъев П. Применение химической кинетики для определения критических параметров газовой детонации // Там же.— 1983.— 19. № 6.— С. 65—76.
8. Гонтковская В. Т., Мержанов А. Г., Озерковская Н. П. и др. Зависимость механизма и кинетики окисления водорода от температуры и давления смеси // Кинетика и катализ.— 1981.— 22, № 5.— С. 1124—1133.

г. Балашиха

Поступила в редакцию 8/VIII 1989,
после доработки — 24/I 1992