

УДК 534.222.2

## О СРЕДНЕЙ СКОРОСТИ ДЕТОНАЦИИ В ПЛОХО ПЕРЕМЕШАННЫХ ГАЗОВЫХ СМЕСЯХ

Е. С. Прохоров

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, prokh@hydro.nsc.ru  
Новосибирский государственный педагогический университет, 630126 Новосибирск

Предложена методика расчета средней скорости фронта плоской детонационной волны в плохо перемешанной смеси газообразного углеводородного топлива и окислителя (кислорода или воздуха). Полагалось, что вдоль направления распространения детонации химический состав смеси имеет периодические флуктуации, например, за счет послойной стратификации газового заряда. Методика основана на анализе функциональной зависимости скорости идеальной (Чепмена — Жуге) детонации от молярной доли (относительной молярной концентрации) топлива. Показано, что средняя скорость детонации может быть значительно (на  $10 \div 15$  %) меньше скорости идеальной детонации. Установлена зависимость, позволяющая на основе измерения средней скорости детонации оценивать степень перемешивания газовой смеси.

Ключевые слова: газовая детонация, флуктуации химического состава, стратификация, скорость фронта, осреднение.

DOI 10.15372/FGV20170611

### ВВЕДЕНИЕ

Скорость фронта детонационной волны является важнейшей и наиболее значительной характеристикой взрывчатого вещества [1]. Для взрывчатых газов существуют хорошо апробированные методики (например, описанная в [2]) расчета параметров установившейся идеальной (без потерь на трение и теплообмен) детонации, часто называемой детонацией Чепмена — Жуге [3, 4], которые основаны на предположении химического равновесия состава продуктов детонационного сгорания (продуктов детонации). Равновесные расчеты достаточно хорошо согласуются с опытными данными, в первую очередь это касается скорости детонационного фронта  $D$ , измеряемой с высокой точностью в экспериментах.

Скорость детонации  $D$  прежде всего зависит от химического состава взрывчатого газа, представляющего собой газообразную смесь топлива и окислителя. В качестве последнего обычно используют кислород или воздух. Опираясь только на величину  $D$ , можно легко оценить значения и других параметров продуктов детонации, таких как давление, плотность, массовая скорость, скорость звука [5].

Понятно, что на практике постоянство значения  $D$  можно обеспечить лишь в случае

идеального перемешивания газовой смеси. При распространении детонационной волны в плохо перемешанной смеси, имеющей флуктуации химического состава, правильнее уже говорить о средней скорости детонации  $\bar{D}$ , поскольку скорость детонационного фронта также будет испытывать флуктуации. Вопрос, насколько  $\bar{D}$  может отличаться от  $D$  в идеально перемешанной смеси, остается открытым.

Такая задача представляет интерес в связи с вопросами взрывобезопасности, разработкой и модернизацией различных технических устройств, рабочим телом которых являются продукты детонации [6, 7]. В подобных устройствах, работающих в непрерывном или импульсном (пульсирующем) режиме, взрывчатая газовая смесь формируется в условиях проточной подачи топлива и окислителя по двум независимым каналам. Понятно, что при таком способе формирования обеспечить полное перемешивание всех компонентов смеси довольно проблематично.

Для оценки степени влияния перемешивания на параметры детонации в [8] предложена упрощенная схема вычислений. В расчетах полагали, что неоднородная по химическому составу смесь представляет собой систему элементарных объемов, равномерно распределенных по пространству. Каждый объем состоял из трех частей: идеально перемешанной

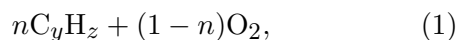
смеси, чистого топлива и чистого окислителя. Причем чистые компоненты в химической реакции не участвуют, т. е. они представляют собой инертный газ. Под степенью перемешивания понималась доля идеально перемешанной смеси  $\beta$  в элементарном объеме. Согласно [8] изменение скорости детонации  $D_\beta$  неоднородной по составу смеси в зависимости от  $\beta$  можно выразить аппроксимирующей формулой  $D_\beta/D = \sqrt{\beta}$ , где  $D$  — скорость детонации идеально перемешанной смеси.

В [9] при тех же предположениях и более точных равновесных расчетах скорости детонации смесей на основе углеводородных топлив данная зависимость была уточнена для значений  $\beta = 0.6 \div 1$ :  $D_\beta/D = \beta^{0.295 \pm 0.005}$ . Однако, как отмечается в работе [9], принятая при расчете модель плохо перемешанной смеси носит несколько искусственный характер, поскольку деление элементарного объема смеси на три резко различающиеся по свойствам части достаточно грубое. Правильнее рассматривать модель, когда в одной части элементарного объема находится смесь данного состава, в другой — несколько обогащенная (топливом) взрывчатая смесь, а в третьей — несколько обедненная взрывчатая смесь.

В настоящей работе предлагается использовать эту модель для оценки средней скорости детонации  $\bar{D}$  в плохо перемешанных газовых смесях. Анализируется влияние на эту скорость флуктуаций химического состава различной степени интенсивности.

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть плоская детонационная волна распространяется вдоль оси  $x$  по взрывчатой смеси, состоящей из газообразного углеводородного топлива  $C_yH_z$  и кислорода  $O_2$ . Химический состав смеси можно описать формулой



где  $n$  — молярная доля (относительная молярная концентрация) топлива в смеси, равная в случае стехиометрического состава величине  $n_{st} = 4/(4y + z + 4)$ .

Для смесей типа (1) методика, подробно описанная в [2], позволяет рассчитать скорость идеальной детонации  $D$ , пока  $n < n_*$  и в продуктах химической реакции отсутствует чистый углерод  $C$ , т. е. когда кислорода в смеси еще достаточно, чтобы окислить  $C$  до оксида

углерода  $CO$ . Из (1) следует, что предельное значение молярной доли топлива  $n_* = 2/(y+2)$ . Таким образом, в дальнейшем будем полагать, что в интервале  $0 < n < n_*$  функциональная зависимость  $D(n)$  известна. Отметим, что при  $n \rightarrow 0$  скорость детонации совпадает со скоростью звука в чистом окислителе (в данном случае в кислороде).

Предположим, что газовая смесь плохо перемешана и вдоль оси  $x$  имеются периодические флуктуации молярной доли топлива  $n$ . Для описания распространения детонационной волны в такой системе разобьем область, занятую газовой смесью, на элементарные объемы, расположенные последовательно друг за другом.

Пусть продольный (вдоль оси  $x$ ) размер этих объемов равен  $L$  и совпадает с пространственным периодом пульсаций  $n$ . Тогда для описания распределения молярной доли топлива  $n = n(x)$  достаточно задать это распределение внутри одного элементарного объема. В соответствии с рекомендациями из [9] такое распределение можно представить в виде кусочно-постоянной функции

$$n(x) = \begin{cases} (1 + \lambda)n & \text{при } 0 \leq x < L/3, \\ n & \text{при } L/3 \leq x < 2L/3, \\ (1 - \lambda)n & \text{при } 2L/3 \leq x \leq L, \end{cases} \quad (2)$$

где безразмерный параметр  $\lambda$  ( $\lambda \geq 0$ ) характеризует амплитуду флуктуаций химического состава газовой смеси. Так, при  $\lambda = 0$  смесь будем считать идеально перемешанной. Из (1) и (2) следует, что флуктуации  $n$  должны приводить к согласованным изменениям относительной молярной доли кислорода в диапазоне от  $(1 - n - \lambda n)$  до  $(1 - n + \lambda n)$  внутри элементарного объема. Отметим, что (2) удовлетворяет условию

$$\bar{n} = \frac{1}{L} \int_0^L n(x) dx = n, \quad (3)$$

где  $\bar{n}$  — средняя молярная концентрация топлива внутри элементарного объема и отклонение  $n(x)$  относительно  $\bar{n}$  не превышает амплитудного значения  $\lambda n$  для флуктуаций химического состава.

Объединяя зависимости (2) и  $D(n)$ , для плохо перемешанной газовой смеси ( $\lambda > 0$ ) можно оценить среднюю скорость детонации  $\bar{D}$

на длине  $L$  с помощью очевидного соотношения

$$\frac{1}{\bar{D}} = \frac{1}{L} \int_0^L \frac{dx}{D}. \quad (4)$$

Такой подход позволяет при варьировании молярной доли топлива  $n$  построить функциональную зависимость  $\bar{D}(n)$  в интервале  $0 < n < \bar{n}_*$ , где  $\bar{n}_* = n_*/(1 + \lambda)$ . Последнее соотношение обусловлено ограничениями используемой модели, поскольку при различных степенях перемешивания газовой смеси значение  $n$  не должно превышать  $n_*$ . Однако эти ограничения не являются совсем уж принципиальными, так как всегда можно воспользоваться известными результатами расчетов детонации при  $n > n_*$  (см., например, [10]), выполненных с помощью компьютерной программы «Безопасность» [11].

Исходя из постановки задачи, можно сделать предварительные выводы относительно  $\bar{D}$  при малых концентрациях топлива. Дело в том, что при  $n \rightarrow 0$  флуктуации химического состава ( $\pm \lambda n$ ) будут также пренебрежимо малы. Поэтому при  $n \rightarrow 0$  зависимости  $\bar{D}(n)$  и  $D(n)$  должны совпадать.

### РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Апробация оценки  $\bar{D}$  выполнена для скорости детонации топливно-кислородной смеси (ТКС) на основе метана  $n\text{CH}_4 + (1 - n)\text{O}_2$  с пространственными флуктуациями ее химического состава в соответствии с (2) при стандартных начальных условиях: давление  $p_0 = 1$  атм и температура  $T_0 = 298.15$  К. Для этой смеси  $n_{st} = 1/3$ , а предельное значение молярной доли топлива  $n_* = 2/3$ .

На рис. 1 представлены расчетные зависимости скорости идеальной детонации  $D(n)$  и средней скорости детонации  $\bar{D}(n)$ , полученные с помощью (4), при различной степени перемешивания топлива и окислителя. Видно, что при любом значении молярной доли топлива  $n$  средняя скорость детонации (кривые 1–3) ниже скорости идеальной детонации (сплошная линия). При  $n < 0.3$  отклонения  $\bar{D}$  от  $D$  незначительны (менее 1 %) даже в случае относительно больших флуктуаций химического состава смеси ( $\lambda = 0.1 \div 0.3$ ). Однако в области  $n_{st} < n < n_*$  различие между  $\bar{D}$  и  $D$  становится весьма существенным. Это обусловлено тем,

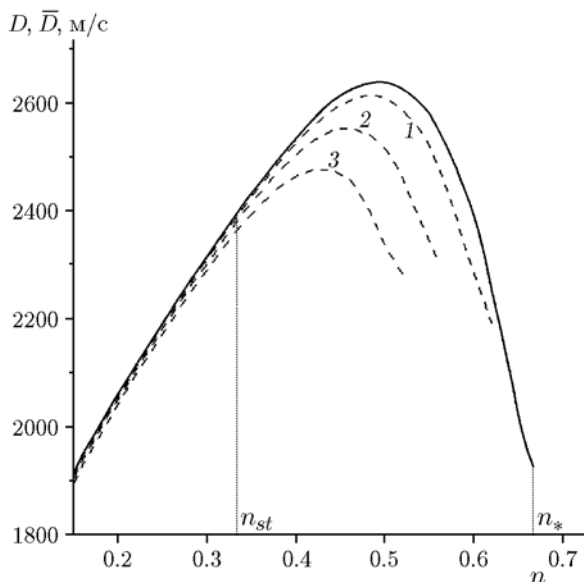


Рис. 1. Скорость идеальной детонации (сплошная линия) и средняя скорость детонации (штриховые линии) плохо перемешанной смеси  $n\text{CH}_4 + (1 - n)\text{O}_2$  в зависимости от молярной доли метана при значениях безразмерного параметра  $\lambda = 0.1$  (1), 0.2 (2), 0.3 (3)

что в указанном диапазоне молярных концентраций метана функция  $D = D(n)$  ведет себя немонотонно и имеет характерный максимум при  $n \approx 0.5$ , когда скорость идеальной детонации  $D$  достигает значения 2635 м/с. Отметим, что в окрестности экстремума функции  $D = D(n)$  отношение  $\bar{D}/D$  будет минимальным. В таблице представлены значения  $\bar{D}/D$ , полученные для точки экстремума ( $n = 0.5$ ) при различных значениях параметра  $\lambda$ . Чем хуже перемешана газовая смесь (возрастает  $\lambda$ ), тем ниже средняя скорость ее детонации  $\bar{D}$ . Так, при  $\lambda = 0.3$  значение  $\bar{D}$  более чем на 11 % меньше скорости детонации  $D$  идеально перемешанной смеси ( $\lambda = 0$ ).

Дополнительные численные исследования показали, что аналогичным поведением обладают зависимости  $D(n)$  и  $\bar{D}(n)$ , полученные для ТКС на основе других углеводородных топлив, например ацетилена  $\text{C}_2\text{H}_2$ , пропана  $\text{C}_3\text{H}_8$  и бутана  $\text{C}_4\text{H}_{10}$ . Расчеты для смеси  $n\text{C}_2\text{H}_2 + (1 - n)\text{O}_2$  указывают на наличие максимума  $D \approx 2934$  м/с вблизи эквимолярного соотношения ( $n = 0.5$ ), а для смеси  $n\text{C}_3\text{H}_8 + (1 - n)\text{O}_2$  скорость идеальной детонации максимальна ( $D \approx 2609$  м/с) при молярной доле топлива  $n = 0.29$ . Для смеси  $n\text{C}_4\text{H}_{10} + (1 - n)\text{O}_2$

Смесь	$n$	$D$ , м/с	$\bar{D}/D$ при $\lambda$					
			0.05	0.1	0.15	0.2	0.25	0.3
$n\text{CH}_4 + (1-n)\text{O}_2$	0.5	2635	0.997	0.989	0.974	0.954	0.923	0.886
$n\text{C}_2\text{H}_2 + (1-n)\text{O}_2$	0.5	2934	0.985	0.967	0.949	0.930	0.913	0.890
$n\text{C}_3\text{H}_8 + (1-n)\text{O}_2$	0.29	2609	0.999	0.995	0.989	0.979	0.967	0.953
$n\text{C}_4\text{H}_{10} + (1-n)\text{O}_2$	0.23	2601	0.999	0.996	0.991	0.984	0.975	0.964

в точке экстремума при  $n = 0.23$  имеем  $D \approx 2601$  м/с. Соответствующие результаты расчетов  $\bar{D}/D$  при варьировании параметра  $\lambda$  для этих ТКС приведены в таблице.

При практическом использовании детонации ТКС наиболее востребованной является именно область  $n_{st} < n < n_*$ , где сильнее всего проявляется немонотонное поведение зависимости  $D(n)$ . Поэтому дефицит скорости детонации  $\Delta D/D = 1 - \bar{D}/D$ , который фиксируется в экспериментах, может служить основанием того, что газовая смесь плохо перемешана.

На рис. 2 представлены результаты расчетов  $\Delta D/D$  в зависимости от амплитуды флуктуаций молярной доли топлива  $\lambda n$  при значениях  $n$ , указанных в таблице. Видно, что расчетные данные достаточно хорошо группиру-

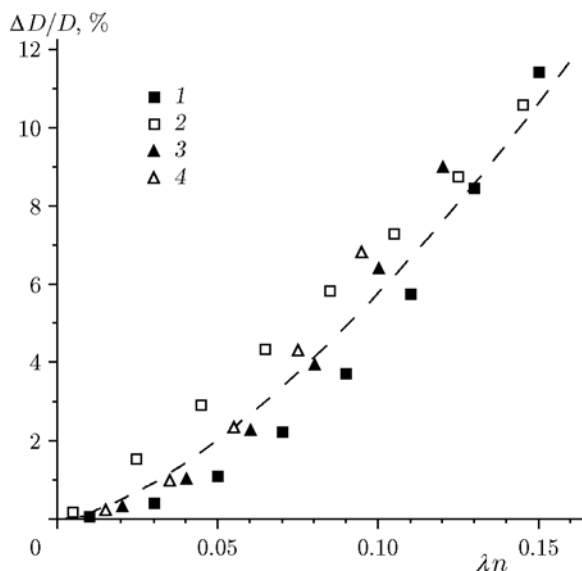


Рис. 2. Оценка дефицита скорости детонации в зависимости от амплитуды флуктуаций молярной доли топлива для различных ТКС:

точки: 1 — смесь  $n\text{CH}_4 + (1-n)\text{O}_2$ , 2 — смесь  $n\text{C}_2\text{H}_2 + (1-n)\text{O}_2$ , 3 — смесь  $n\text{C}_3\text{H}_8 + (1-n)\text{O}_2$ , 4 — смесь  $n\text{C}_4\text{H}_{10} + (1-n)\text{O}_2$ ; штриховая линия — зависимость (5)

ются около кривой (штриховая линия), которую можно описать аппроксимирующей формулой

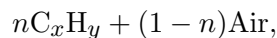
$$\Delta D/D = (1.5\lambda n)^{1.5}. \quad (5)$$

Зависимость (5) позволяет решать обратную задачу, а именно: на основе измерений скорости детонации оценивать степень перемешивания смеси  $\bar{\beta}$ , которую можно определить как  $\bar{\beta} = 1 - \lambda n$ .

## ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для детонационного сгорания углеводородных топлив на практике в качестве окислителя часто используется воздух. Поэтому уместно проанализировать возможности предложенной методики для расчета средней скорости детонации в плохо перемешанных топливно-воздушных смесях (ТВС).

Оказывается для этого достаточно незначительно изменить постановку задачи, а именно вместо (1) описать химический состав ТВС формулой



где состав 1 моля воздуха можно представить в виде  $\text{Air} = 0.21\text{O}_2 + 0.78\text{N}_2 + 0.01\text{Ar}$ .

В качестве иллюстрации пригодности такого подхода на рис. 3 приведены расчетные зависимости скорости идеальной детонации  $D(n)$  и средней скорости детонации  $\bar{D}(n)$  для смеси метана и воздуха  $n\text{CH}_4 + (1-n)\text{Air}$ . Для этой смеси  $n_{st} = 0.095$ , а предельное значение молярной доли топлива  $n_* = 0.296$ . Расчеты указывают на наличие максимума  $D \approx 1833$  м/с вблизи стехиометрического соотношения (при  $n = 0.11$ ). Отметим, что в ТВС при столь малых значениях  $n$  заметные отклонения  $\bar{D}$  от  $D$  будут наблюдаться только при повышенных значениях безразмерного параметра  $\lambda$ . Так, при  $\lambda = 0.3$  в окрестности экстремума функции

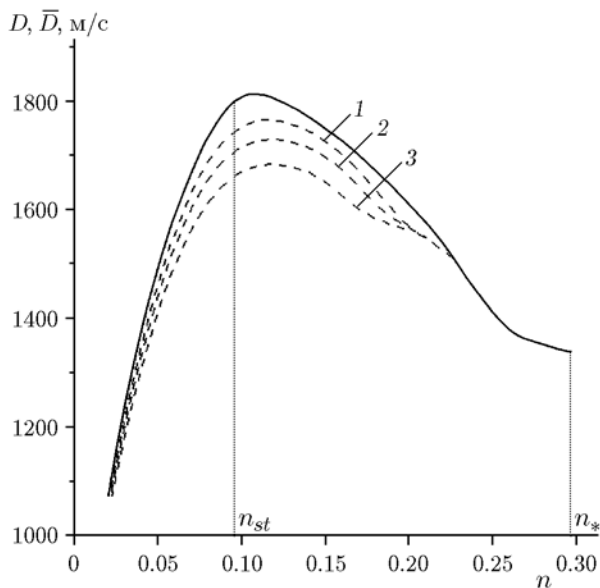


Рис. 3. Скорость идеальной детонации (сплошная линия) и средняя скорость детонации (штриховые линии) плохо перемешанной взрывчатой смеси  $n\text{CH}_4 + (1 - n)\text{Air}$  в зависимости от молярной доли метана при значениях безразмерного параметра  $\lambda = 0.3$  (1), 0.4 (2), 0.5 (3)

$D = D(n)$  отличие  $\bar{D}$  от  $D$  для идеально перемешанной смеси ( $\lambda = 0$ ) не превышает 3 %.

Распределение молярной доли топлива (2) представляет собой разделение (стратификацию) смеси внутри элементарного объема на три равных по ширине газовых слоя с различным химическим составом. При таком распределении формула (4) может быть преобразована к виду

$$\frac{1}{\bar{D}} = \frac{1}{3D(n + \lambda n)} + \frac{1}{3D(n)} + \frac{1}{3D(n - \lambda n)},$$

т. е. для расчета  $\bar{D}$  необходимо задать  $D$  при трех значениях молярной концентрации:  $n$  и  $n \pm \lambda n$ . Отсюда следует (из-за коммутативности сложения), что при определении  $\bar{D}$  последовательность расположения стратифицированных слоев внутри элементарного объема не играет никакой роли. Этот факт будет использован при дальнейшем анализе. Для выпуклой вверх функции  $D = D(n)$  в окрестности ее максимума отношение  $D(n \pm \lambda n)/D(n) < 1$ , поэтому при  $\lambda n \neq 0$  средняя скорость детонации  $\bar{D}(n)$  всегда будет меньше  $D(n)$ .

Понятно, что распределение (2) не является единственно верным. Количество стратифицированных слоев внутри элементарного объе-

ма может быть произвольным. Чтобы проанализировать влияние количества таких слоев на результаты расчета  $\bar{D}$  и соответственно дефицита скорости детонации  $\Delta D/D$ , рассмотрим два крайних случая.

Пусть в первом случае количество слоев равно двум, и тогда распределение молярной доли топлива  $n = n(x)$  внутри одного элементарного объема можно представить в виде кусочно-постоянной функции

$$n(x) = \begin{cases} (1 - \lambda)n & \text{при } 0 \leq x < L/2, \\ (1 + \lambda)n & \text{при } L/2 \leq x \leq L. \end{cases} \quad (6)$$

В другом случае слоев бесконечно много (непрерывное распределение) и зависимость  $n = n(x)$  можно представить в виде линейной функции

$$n(x) = (1 - \lambda)n + 2\lambda n \frac{x}{L} \quad \text{при } 0 \leq x \leq L. \quad (7)$$

Распределение (7) допускает также следующую интерпретацию. В силу сделанного ранее замечания о том, что при расчете  $\bar{D}$  последовательность расположения слоев не играет никакой роли, выражение (7) можно заменить эквивалентным распределением («зеркальным отражением»)

$$n(x) = (1 + \lambda)n - 2\lambda n \frac{x}{L} \quad \text{при } 0 \leq x \leq L. \quad (8)$$

Тогда, предполагая чередование (7) и (8) в соседних элементарных объемах, получаем распределение молярной доли топлива вдоль всей оси  $x$  в виде непрерывной периодической функции, имеющей «пилообразную» форму. Несмотря на увеличение периода флуктуаций химического состава в два раза, результаты оценки  $\bar{D}$  при использовании этой функции для осреднения и оценки  $\bar{D}$  с помощью (7) будут идентичны.

Отметим, что так же, как и (2), функции (6) и (7) не противоречат условию (3). Соответствующие расчеты  $\Delta D/D$  для них иллюстрирует рис. 4. Здесь же для сравнения представлена зависимость (5). Полученные результаты можно трактовать следующим образом. Чем меньше используется стратифицированных слоев для моделирования распределения  $n(x)$ , тем грубее перемешана газовая смесь перед инициированием детонации. Это может приводить к значительному снижению средней скорости детонации  $\bar{D}$ , измеряемой в эксперименте, по сравнению с  $D$ . Так, при переходе от

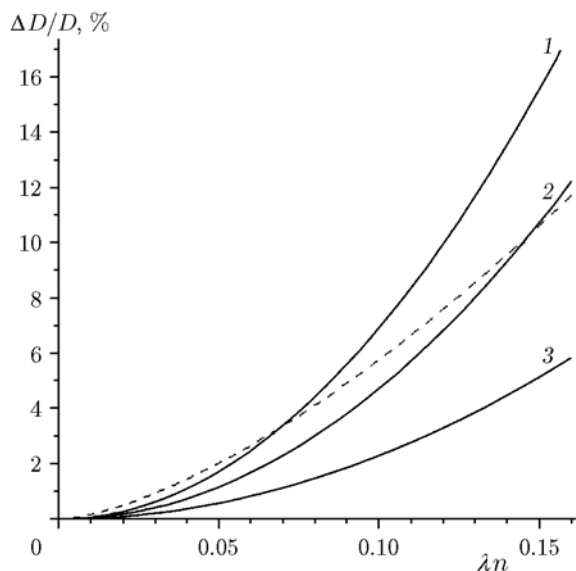


Рис. 4. Дефицит скорости детонации плохо перемешанной взрывчатой смеси  $n\text{CH}_4 + (1-n)\text{O}_2$  в зависимости от амплитуды флуктуаций молярной доли топлива при различных закономерностях пространственного распределения химического состава смеси:

1 — распределение (6), 2 — распределение (2), 3 — распределение (7), штриховая линия — зависимость (5)

распределения (2) к (6) значение  $\Delta D/D$  возрастает примерно в 1.5 раза.

Также можно утверждать и обратное. Чем больше используется стратифицированных слоев, тем более «плавным» будет распределение  $n(x)$ . Обычно такое происходит, когда за счет переноса (конвекции, диффузии) между соседними слоями возле контактных границ формируются протяженные области перемешивания. В этом случае отличие между  $\bar{D}$  и  $D$  будет менее заметным. Так, при переходе от распределения (2) к (7) значение  $\Delta D/D$  уменьшается примерно в два раза.

В заключение отметим, что при количестве слоев более 10 результаты расчетов  $\Delta D/D$  практически не отличаются от кривой 3 на рис. 4, соответствующей распределению (7).

## ВЫВОДЫ

Численно исследовано влияние периодических флуктуаций химического состава различной степени интенсивности на среднюю скорость детонации в плохо перемешанных кислородных и воздушных взрывчатых смесях на основе углеводородных топлив. Существует диа-

пазон относительных молярных концентраций топлива, при которых возможны значительные отклонения (в меньшую сторону) такой скорости от скорости детонации идеально перемешанной смеси. Это обусловлено тем, что расчетная зависимость скорости идеально детонации от молярной доли топлива ведет себя немонотонно и имеет характерный максимум. Для плохо перемешанных газовых смесей получена аппроксимирующая формула, описывающая взаимосвязь средней скорости детонации и амплитуду флуктуаций химического состава.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Физика взрыва** / под ред. К. П. Станюковича. — М.: Наука, 1975.
2. **Николаев Ю. А., Топчийн М. Е.** Расчет равновесных течений в детонационных волнах в газах // *Физика горения и взрыва*. — 1977. — Т. 13, № 3. — С. 393–404.
3. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Теоретическая физика. Т. VI: Гидродинамика. — М.: Наука, 1986.
4. **Митрофанов В. В.** Детонация гомогенных и гетерогенных систем. — Новосибирск: ИГиЛ СО РАН, 2003.
5. **Прохоров Е. С.** Изотермическая модель газовой детонации // *Инж.-физ. журн.* — 2015. — Т. 88, № 3. — С. 703–709.
6. **Баженова Т. В., Голуб В. В.** Использование газовой детонации в управляемом частотном режиме (обзор) // *Физика горения и взрыва*. — 2003. — Т. 39, № 4. — С. 3–21.
7. **Николаев Ю. А., Васильев А. А., Ульяничский В. Ю.** Газовая детонация и ее применение в технике и технологиях (обзор) // *Физика горения и взрыва*. — 2003. — Т. 39, № 4. — С. 22–54.
8. **Быковский Ф. А.** О влиянии степени перемешивания газов на параметры детонации // *Динамика сплошных сред*. — 1983. — Вып. 62. — С. 23–31.
9. **Михалкин В. Н.** Термодинамический расчет детонации в плохо перемешанных газовых смесях // *Физика горения и взрыва*. — 1996. — Т. 32, № 1. — С. 66–70.
10. **Васильев А. А., Дроздов М. С., Хидиров С. Г.** Неклассические режимы дифракции волн в горючих смесях // *Физика горения и взрыва*. — 2006. — Т. 42, № 6. — С. 137–143.
11. **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.

Поступила в редакцию 1/II 2017 г.