

5. R. D. Dick. J. Chem. Phys., 1970, 52, 12, 6021.
 6. А. Я. Аппи, Е. П. Бардин, Н. Ф. Велина. Взрывное дело, № 52/9. М.: Госгортехиздат, 1959.
 7. И. М. Воскобойников, А. А. Котомин. ФГВ, 1985, 21, 5, 93.

Поступила в редакцию 6/II 1986,
 после доработки — 7/VII 1986

РАСЧЕТ КРИТИЧЕСКОЙ ТОЛЩИНЫ ГАЗОВОГО СЛОЯ ПО ОТНОШЕНИЮ К РАСПРОСТРАНЕНИЮ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ

Ю. Н. Шебеко, А. Я. Корольченко, О. Я. Еременко
 (Балашиха)

Изучение распространения детонационных волн (ДВ) в газовых слоях конечной толщины, граничащих с твердой стенкой, представляет интерес в связи с исследованием околопредельных явлений при детонации и с необходимостью 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 $\delta_{кр}$ по отношению к стационарному или квазистационарному (пульсирующий режим) распространению ДВ. Значения $\delta_{кр}$ для некоторых газовых смесей ($2\text{H}_2 + \text{O}_2$, $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$) измеряли в работах [1, 2] и рассчитывали в [3—5]. Опытное определение, безусловно, дает наиболее достоверные величины $\delta_{кр}$, однако такие эксперименты весьма трудоемки и дорогостоящи. Более доступны расчетные методы, среди которых в качестве наиболее надежного следует отметить численное моделирование распространения детонации в газовом слое.

В настоящей работе методика численного моделирования распространения ДВ в газовых объемах конечной толщины из [4, 5] с более адекватным описанием химической кинетики использована для расчета $\delta_{кр}$ смесей $2\text{H}_2 + \text{O}_2$, 29% $\text{H}_2 + 71\%$ воздух, 23% $\text{H}_2 + 77\%$ воздух, $4\text{H}_2 + \text{O}_2$.

Для моделирования распространения ДВ взяты двумерные уравнения газодинамики в лагранжевом описании, дополненные уравнением химической кинетики в аррениусовском виде:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -A c \rho \exp(-E/RT). \quad (1)$$

Здесь c — относительная концентрация гремучей смеси ($0 \leq c \leq 1$); ρ , T — плотность и температура газа; A , E — предэкспоненциальный фактор и энергия активации. Величины A и E подобраны таким образом, чтобы правильно описывать экспериментальную зависимость периода индукции самовоспламенения гремучей смеси от температуры [6]. Их значения составляют $3 \cdot 10^{11}$ см³/(г·с) и 84 кДж/моль соответственно.

Удельное тепловыделение в результате химической реакции рассчитывали по формуле

$$Q = Q_0(c_0 - c), \quad (2)$$

где Q_0 — эффективная удельная теплота сгорания гремучей смеси; c_0 — начальная концентрация гремучей смеси ($0 \leq c \leq c_0 \leq 1$). Методика расчета подробно изложена в [4, 5].

Применимость аррениусовского описания химической кинетики для расчета критической толщины газового слоя вытекает из того, что возможность распространения детонации в нем определяется соотношением характерных времен охлаждения за счет боковой разгрузки и химической реакции. Характерное время химической реакции близко к периоду индукции самовоспламенения гремучей смеси, которое в определенных тем-

пературных интервалах может быть с удовлетворительной точностью описано аррениусовской зависимостью [6].

В то же время известно, что аррениусовское описание кинетики химической реакции в детонационной волне весьма приближенно [7] и для получения точных количественных данных необходимо моделировать реакции с помощью достаточно полной кинетической схемы. Однако такой путь влечет за собой большие затраты машинного времени, поэтому имеет ограниченную область применимости. Более перспективным представляется использование полуэмпирической зависимости (1), в которой параметры подобраны по совпадению результатов расчета с отдельными экспериментальными данными по $\delta_{кр}$. К сожалению, в настоящее время отсутствуют надежные экспериментальные данные по значениям критической толщины газового слоя. Поэтому такое сравнение целесообразно провести по совпадению расчетного и экспериментального значения для какого-либо определяющего параметра ДВ в данной горючей смеси. В качестве такого параметра может быть выбрана скорость детонационной волны D . При этом расчетное значение D следует находить при больших $\delta \gg \delta_{кр}$, а в качестве экспериментального значения D может быть взята скорость Чепмена — Жуге D_0 (например, из [8, 9]). Согласно [10], скорость детонации — один из важнейших параметров детонационной волны. В частности, она определяет скачок температуры в УВ и тем самым период индукции самовоспламенения, что особенно важно с точки зрения задачи расчета $\delta_{кр}$.

В связи с этим в настоящей работе для каждой из исследованных смесей путем варьирования Q_0 находились такие значения этого параметра, при которых наблюдается соответствие расчетной скорости детонации при $\delta \gg \delta_{кр}$ со скоростью Чепмена — Жуге для данной смеси. Ниже приведены результаты расчета D для различных Q_0 , а также значения D_0 для указанной смеси.

Исходя из представленных в таблице данных, для первых трех смесей принято $Q_0 = 3,5 \cdot 10^3$ Дж/г, а для четвертой смеси — $4,0 \cdot 10^3$ Дж/г. В результате расчетов сделаны следующие оценки: для $2H_2 + O_2$ $1,35 \leq \delta_{кр} \leq 1,80$ см, 29% $H_2 + 71\%$ воздух — $9,0 \leq \delta_{кр} \leq 13,5$ см, для 23% $H_2 + 77\%$ воздух $27,0 \leq \delta_{кр} \leq 36,0$ см, $4H_2 + O_2$ — $4,5 \leq \delta_{кр} \leq 6,8$ см.

Как и в [4, 5], у изученных смесей обнаружен сильнопульсирующий режим распространения детонационной волны, объяснение происхождения которого дано в [4].

Представляет интерес исследовать, как неопределенность параметров A и E , входящих в полуэмпирическую аппроксимацию (1), влияет на результаты расчета $\delta_{кр}$. С этой целью проведены расчеты для смеси $2H_2 + O_2$ с использованием полуэмпирической аппроксимации для периода индукции τ из работы [11]:

$$\tau = \frac{6,9 \cdot 10^{-11}}{[O_2]} \exp(16328/RT)$$

(τ — в с, $[O_2]$ — в моль/л, R — в кал/моль, T — в К). Для этой аппроксимации определена также зависимость скорости детонации для смесей

Смесь	$Q_0 \cdot 10^{-3}$, Дж/г	δ , см	$D \cdot 10^{-3}$, м/с	$D_0 \cdot 10^{-3}$, м/с
$2H_2 + O_2$	3,0	9,0	2,5	2,84 [8]
	3,5	3,6	3,0	
	4,5	3,6	3,1	
29% H_2 + 71% воздух	3,5	18,0	1,9	1,97 [9]
	3,5	72,0	1,8	1,80 [9]
$4H_2 + O_2$	3,5	72,0	3,0	3,40 [8]
	4,0	18,0	3,6	
	4,5	18,0	3,8	

$2\text{H}_2 + \text{O}_2$ от параметра Q_0 ($\delta = 9$ см):

$Q_0 \cdot 10^{-3}$, Дж/г	3,5	4,0	4,5	4,8
$D \cdot 10^{-3}$, м/с	2,5	2,8	3,0	3,2

Исходя из представленных данных, в данной серии расчетов принято $Q_0 = 4,0 \cdot 10^3$ Дж/г. Дальнейшие вычисления дали следующий результат: $1,35 \leq \delta_{кр} \leq 1,80$ см. Таким образом, при относительно небольшом варьировании параметров A и E с соответствующим выбором Q_0 значения $\delta_{кр}$ изменяются относительно слабо.

Во многих работах делаются попытки связать предельные характеристики ДВ (критическая энергия иницирования, диаметр и размер прямоугольного канала) с размером ячейки детонации λ . Возникает вопрос, будет ли наблюдаться линейная зависимость между λ и $\delta_{кр}$, подобно тому, как это наблюдается для критического диаметра. Выявлено, что в пределах точности расчетов настоящей работы такая взаимосвязь имеет место с коэффициентом пропорциональности от 6 до 12. Значения λ для расчетов взяты из работы [12]. Столь большой разброс в значениях коэффициента пропорциональности обусловлен, вероятно, невысокой точностью расчетных величин $\delta_{кр}$.

Сопоставим результаты расчета $\delta_{кр}$ с экспериментальными данными для смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$, полученными в работе [13], где $\delta_{кр} > 2,5$ см. Эта величина заметно превосходит полученную в настоящей работе ($1,35 < \delta_{кр} < 1,80$ см). Причина расхождения, вероятно, состоит в не совсем точном описании кинетики химических реакций в виде уравнения (1) или (2). В связи с этим интересен расчет $\delta_{кр}$ с детальным учетом химического механизма окисления водорода в ударных волнах. Частично расхождение результатов расчета и эксперимента может быть обусловлено конечной шириной газового слоя в экспериментах [13], равной 5,8 см, которая сравнима с толщиной газового слоя (2,5 см).

В будущем следует продолжить начатые исследования в основном в плане уточнения теоретической модели.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. K. Debra, L. A. Nicholls, R. B. Morricov. 10-th Symp. (Internat.) on Combustion. Pittsburgh: The Combustion Institute, 1965.
2. А. А. Васильев. ФГВ, 1982, 18, 3, 98.
3. F. A. Williams. Comb. Flame, 1976, 26, 3, 403.
4. М. Ф. Иванов, В. Е. Фортов, А. А. Борисов. ФГВ, 1981, 17, 3, 108.
5. М. Ф. Иванов, Ю. И. Шебеко, А. Я. Корольченко. ФГВ, 1984, 20, 2, 118.
6. В. И. Димитров. Простая кинетика. Новосибирск: Наука, 1982.
7. Ю. А. Николаев. ФГВ, 1978, 14, 2, 73.
8. Ю. А. Николаев, М. Е. Топчиан. ФГВ, 1977, 13, 3, 393.
9. A. L. Camp, J. C. Cummings, M. P. Sherman e. a. Light Water Reactor Hydrogen Manual. Albuquerque: Sandia National Laboratory, 1983.
10. Я. Б. Зельдович, А. С. Компанеец. Теория детонации. М.: ГИТТЛ, 1955.
11. В. Ю. Ульяницкий. ФГВ, 1980, 16, 5, 101.
12. C. M. Guirao, R. Knystautas, J. H. Lee e. a. 19-th Symposium (Internat.) on Combustion. Pittsburgh: The Combustion Institute, 1982.
13. А. А. Васильев, Д. В. Зак. ФГВ, 1986, 22, 4, 82.

Поступила в редакцию 11/XI 1985,
после доработки — 11/X 1986