

ДИФРАКЦИОННАЯ ОЦЕНКА КРИТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ ИНИЦИИРОВАНИЯ ГАЗОВОЙ ДЕТОНАЦИИ

А. А. Васильев

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск

Предложен критерий возбуждения детонации: критическая энергия инициирования равна работе, совершаемой расширяющимися продуктами детонации на пути, равном продольному размеру ячейки. Начальный радиус слоя выбирается совпадающим с радиусом дифрагирующей на краю прямого угла детонационной волны в момент схождения аксиальной волны разрежения до оси газового заряда. Получены формулы для оценки критической энергии инициирования плоской, цилиндрической и сферической детонационных волн. Расчетные величины хорошо согласуются с экспериментальными.

Определение критической энергии инициирования E_* — одна из важнейших проблем детонации, имеющей научное и прикладное значение (экология и взрывобезопасность). К настоящему времени известно около 20 различных приближенных подходов к оценке E_* . Около половины из них (в основном, предложенных зарубежными авторами) проанализировано в [1]. Основной вывод работы [1] — расчетные величины E_* заметно различаются (на несколько порядков), а с наименьшими отклонениями имеющиеся экспериментальные данные по инициированию описывают модель «поверхностной энергии» (изложена в [1]) и модель многоточечного инициирования [2] (предварительные исследования по многоточечной модели изложены в [3, 4]).

Наиболее полно анализ известных к настоящему времени способов оценки E_* , корреляции оценок между собой и соответствия расчетных величин экспериментальным представлен в [5, 6]. Расширение числа анализируемых оценок сохранило независимый вывод [1] о приоритетности модели многоточечного инициирования, добавив к [1, 2] оценку, предложенную в [7]. Тем не менее, даже «лучшие» модели при одинаковых кинетических константах дают разброс расчетных значений E_* в несколько раз: например, для инициирования сферической детонационной волны (ДВ) в стехиометрической смеси водорода с воздухом $E_* \approx 4,5 \cdot 10^2$ Дж по формулам [1], $E_* \approx 1,4 \cdot 10^3$ Дж в соответствии с [7] и $E_* \approx 3,2 \cdot 10^3$ Дж по формулам модели многоточечного инициирования. Потому новые подходы по уточнению E_* остаются по-прежнему актуальными, особенно для

практического использования.

Во всех приближенных (и, как правило, одномерных) подходах вслед за [8] вначале тем или иным способом определяется наиболее критический для формирования детонационной волны параметр: амплитуда инициирующей волны, длительность ее воздействия, характерный радиус волны, размер или период индукционной зоны и т. д. Затем с использованием такого критического параметра пересчитывается энергия инициирования E_* . Для расходящихся волн условие одномерности позволяет отслеживать динамику инициирования вдоль какого-то одного направления или в пределах отдельно взятой трубки тока. В данной работе выбор критического параметра инициирования осуществляется на основе явления дифракции ДВ на прямом угле (см., например, [2, 5, 8–10]).

Дифракционное реиницирование многофронтной детонации — широко используемая в лабораторных условиях экспериментальная методика возбуждения ДВ (рис. 1). Критерий реиницирования традиционно формулируется через характерный размер инициирующей секции: диаметр трубки d_{**} — для сферической ДВ ($\nu = 3$) и ширина плоского канала l_{**} — для цилиндрической волны ($\nu = 2$) (см., например, [8, 9]).

При выходе ДВ из трубки диаметром d в объем возникает аксиальная волна разрежения, фронт которой при своем распространении по фронту ДВ постепенно срывает химическую реакцию с флангов ДВ (см. рис. 1). Волна разрежения достигает оси в момент времени

$$t_* = 0,5d/v_{\perp} = 0,5d/D \operatorname{tg} \varphi,$$

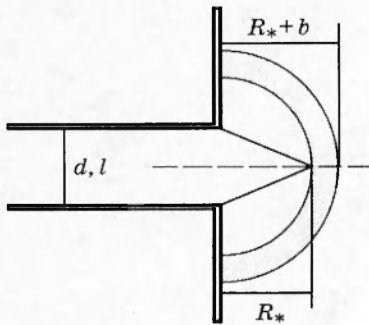


Рис. 1. Схема дифракционного реиницирования многофронтной детонации

где v_{\perp} — радиальная скорость «волны срыва химической реакции», близкая к средней радиальной скорости распространения поперечных волн детонационного фронта (которая, в свою очередь, близка к скорости звука в продуктах детонации $c \approx 0,55D_0$, D_0 — скорость идеальной детонации Чепмена — Жуге); D — средняя скорость распространения многофронтной ДВ; φ — средний угол наклона траекторий поперечных волн относительно оси. При $d < d_{**}$ к моменту $t = t_*$ по всему фронту химическое тепловыделение из детонационного режима сгорания сорвано до режима турбулентного горения, а многофронтная структура самоподдерживающейся ДВ разрушена. Более того, в момент времени $t = t_*$ происходит и последнее соударение поперечных волн (последний микровзрыв). При $d > d_{**}$ происходит реиницирование расходящейся многофронтной ДВ, и вслед за микровзрывом, соответствующим моменту t_* , в приосевой трубке тока будут происходить последующие микровзрывы с пространственным шагом, совпадающим с продольным размером ячейки b .

Рассмотрим приосевую трубку тока. Вплоть до момента времени t_* ДВ вдоль нее распространяется с постоянной скоростью \bar{D} , а продукты реакции характеризуются параметрами, соответствующими стационарной ДВ. В такой трубке фронт ДВ к моменту t_* удаляется от среза трубки на расстояние

$$\Delta z = \bar{D}t_* = 0,5d / \operatorname{tg} \varphi.$$

Следует особо подчеркнуть, что продольный размер ячейки b в такой стационарной волне выступает как характерный масштаб восстановления структуры ДВ и ее повторяемости (для любой симметрии ДВ).

Отметим, что в направлении, поперечном к оси трубки, расширение дифрагирующей волны идет со скоростью $D_{\perp} \approx 0,5\bar{D}$ (в плоскости среза трубки). Такая же величина получается при решении задачи об одномерном распаде разрыва на границе области неподвижных продуктов детонации и исходной смеси — распад области высокого давления без динамического подпора продуктов. К моменту t_* дифрагирующей волной будет охвачена область диаметром

$$d(t_*) = d + 2D_{\perp}t_* \approx d(1 + 0,5 / \operatorname{tg} \varphi).$$

В первом приближении $\operatorname{tg} \varphi \approx c/D_0$, и потому в момент времени $t = t_*$ дифрагирующую волну можно считать одномерной с радиусом $R_3 \approx \Delta z \approx 0,9d$.

Для исследуемой смеси и фиксированного начального давления варьирование диаметра позволяет изменять величину Δz , при этом расстояние Δz_* соответствует значению d_{**} . Последний микроинициатор в приосевой трубке тока, каковым является область соударения поперечных волн, становится своеобразным индикатором: его положение относительно Δz_* однозначно свидетельствует о последующем развитии процесса — затухание при $\Delta z < \Delta z_*$ и реиницирование ДВ при $\Delta z > \Delta z_*$. Поскольку все события в приосевой трубке тока могут быть перенесены на весь фронт в силу изотропности ДВ (для любой симметрии волны), то именно величину $\Delta z_* = R_*$ логично определить как критический параметр иницирования. Критическому режиму сферического иницирования соответствует $R_{3*} \approx 0,9d_{**}$. Для цилиндрической ДВ справедливы те же рассуждения с заменой d на l : $R_{2*} \approx 0,9l_{**}$.

Точки $R_{\nu*}$ — критические для реиницирования ДВ. Именно здесь определяется ход последующих событий и именно здесь важна энергия внешнего инициатора. Величина этой энергии должна быть такой, чтобы компенсировать химическое недовыделение энергии после момента времени t_* и обеспечить восстановление ДВ на масштабе b , характерном для самоподдерживающегося режима распространения ДВ. При меньших энергиях инициатора восстановление ДВ не произойдет, процесс сорвется.

По этой причине естественно сформулировать критерий возбуждения детонации в следующем виде: критическая энергия иницирования должна превышать работу расширения продуктов детонации на протяжении слоя тол-

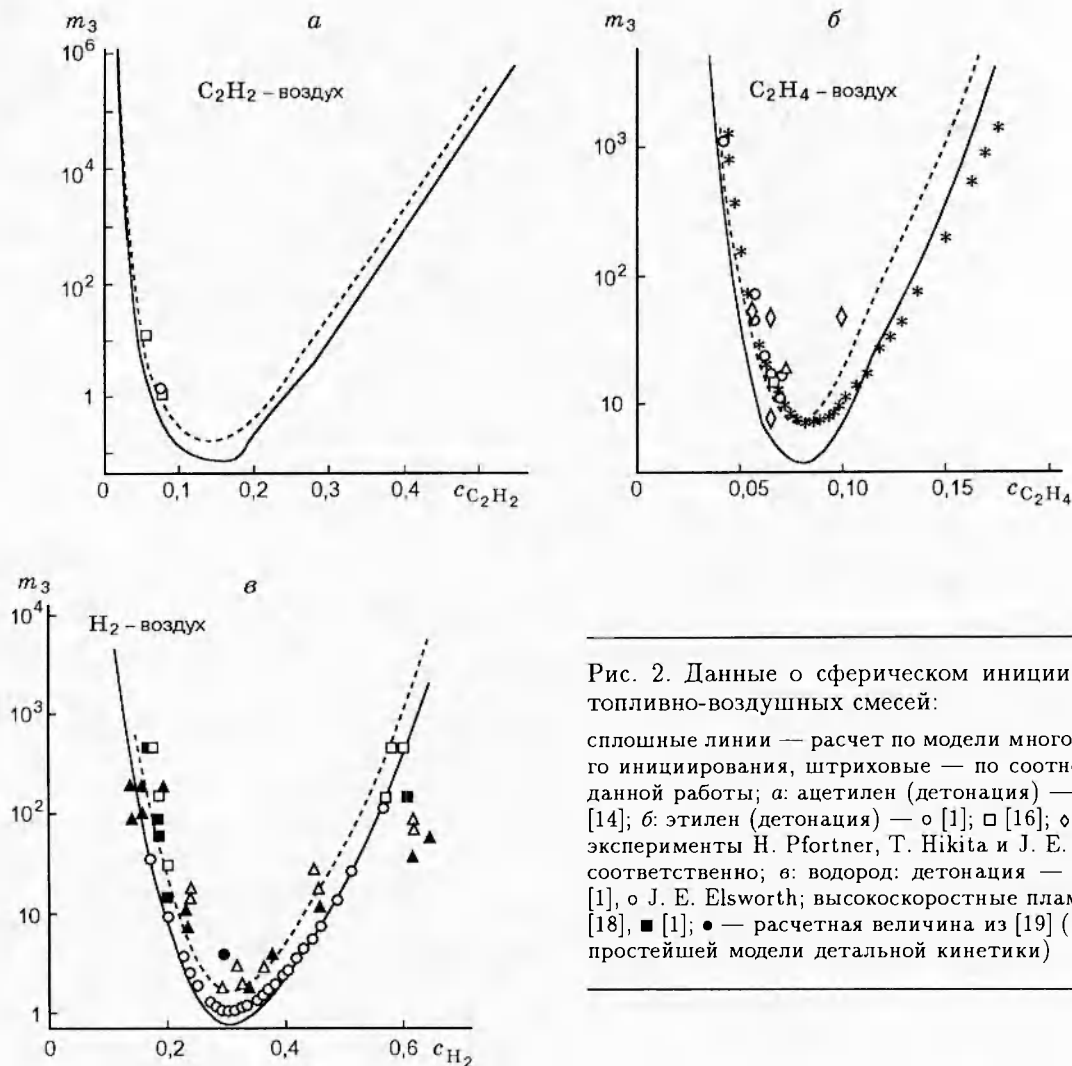


Рис. 2. Данные о сферическом инициировании топливно-воздушных смесей:

сплошные линии — расчет по модели многоточечного инициирования, штриховые — по соотношениям данной работы; а: ацетилен (детонация) — о [15], □ [14]; б: этилен (детонация) — о [1]; □ [16]; ◇, △ и * — эксперименты Н. Pfortner, Т. Hikita и J. E. Elsworth соответственно; в: водород: детонация — △ [18], □ [1], о J. E. Elsworth; высокоскоростные пламена — ▲ [18], ■ [1]; ● — расчетная величина из [19] (в рамках простейшей модели детальной кинетики)

щиной b , отсчитываемого от критической точки:

$$\begin{aligned}
 E_{3*} &= \int_{R_*}^{R_*+b} p_{CJ} 4\pi r^2 dr = \\
 &= 4\pi p_{CJ} (3R_{3*}^2 b + 3R_{3*} b^2 + b^3) / 3 \approx \\
 &\approx \rho_0 D_0^2 b^3 4\pi p_{CJ} [2,4 \operatorname{tg}^2 \varphi (d_{**}/a)^2 + \\
 &\quad + 2,7 \operatorname{tg} \varphi d_{**}/a + 1] / \gamma_0 M_0^2 = B_3 \rho_0 D_0^2 b^3, \\
 E_{2*} &= \int_{R_*}^{R_*+b} p_{CJ} 2\pi r dr = \pi p_{CJ} (2R_{2*} b + b^2) \approx \\
 &\approx \rho_0 D_0^2 b^2 \pi p_{CJ} (1,8 \operatorname{tg} \varphi l_{**}/a + 1) / (\gamma_0 M_0^2) = \\
 &= B_2 \rho_0 D_0^2 b^2,
 \end{aligned}$$

где D_0 и M_0 — скорость и число Маха ДВ Чепмена — Жуге (CJ); p_0 , ρ_0 и γ_0 — давление,

плотность и показатель адиабаты исследуемой смеси, p_{CJ} — давление продуктов; $a = b \operatorname{tg} \varphi$ — поперечный размер ячейки; $\pi_{CJ} = p_{CJ}/p_0$. В качестве часто употребляемых при оценках $E_{\nu*}$ выражений известны $\dot{a}_{**}/a \approx 13 = \operatorname{const}$ и $l_{**}/a \approx 10 = \operatorname{const}$ (см., например, [9, 10]).

Применяя базовый критерий к плоскому инициированию, получаем

$$\begin{aligned}
 E_{1*} &= \int_{R_*}^{R_*+b} p_{CJ} dr = p_{CJ} b \approx \\
 &\approx \rho_0 D_0^2 b \pi p_{CJ} / \gamma_0 M_0^2 = B_1 \rho_0 D_0^2 b,
 \end{aligned}$$

причем E_{1*} не зависит от R_* . Общая формула —

$$E_{\nu*} = B_{\nu} \rho_0 D_0^2 b^{\nu}.$$

В соответствии с экспериментальными исследованиями последних лет условие постоянства d_{**}/a и l_{**}/a для любых смесей и начальных давлений не является универсальным. Потому в [5, 11, 12] определено более корректное соотношение между характерными для реинициирования критическими размерами инициирующих каналов в случаях $\nu = 2$ и 3:

$$l_{**} = \sqrt{\pi} d_{**} / 4,$$

и предложено аппроксимационное соотношение для l_{**} :

$$l_{**}/a \approx 2/(\gamma - 1) E_{ind}/Q,$$

где E_{ind} — эффективная энергия активации индукционного периода, Q — удельное тепловыделение смеси.

В результате получается следующая последовательность расчета критических энергий:

- 1) a (или b) — экспериментальные данные или расчет по [13];
- 2) приближенные соотношения $l_{**}/a \approx 10$ и $d_{**}/a \approx 13$ из [9, 10] или расчет l_{**} и d_{**} с помощью приведенных выше формул;
- 3) R_{2*}, R_{3*} ;
- 4) и наконец, — E_{1*}, E_{2*} и E_{3*} .

Следует отметить, что (как видно из конечных формул) значение E_* линейно зависит от p_{CJ} для любой симметрии, потому неопределенность p_{CJ} (замена на αp_{CJ} с $\alpha < 1$) в такой же мере влияет и на E_* . Основная неточность в определении E_* обусловлена не выбором p_{CJ} или R_*/b , а размером ячейки b (или a). В данной работе использованы рассчитанные согласно [13] величины. Например, для стехиометрических топливно-кислородных и топливно-воздушных смесей ($p_0 = 1,0$ атм) имеем:

Топливо	H ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄	CH ₄
a , мм	1,6/10,9	0,17/7,9	0,19/14,1	3,5/273

При этом значения a хорошо согласуются с экспериментом [5].

На рис. 2 представлены расчетные и экспериментальные результаты инициирования ацетилено-, этилено-, водородовоздушных смесей (сферическое инициирование зарядами ВВ, m_* — масса заряда в граммах ТНТ, c — мольная концентрация топлива в смеси). Экспериментальные данные взяты из [14–18] (в том числе использованы и приведенные в этих работах результаты других исследователей, оригиналы статей которых автору недоступны). Для стехиометрической водородовоздушной смеси

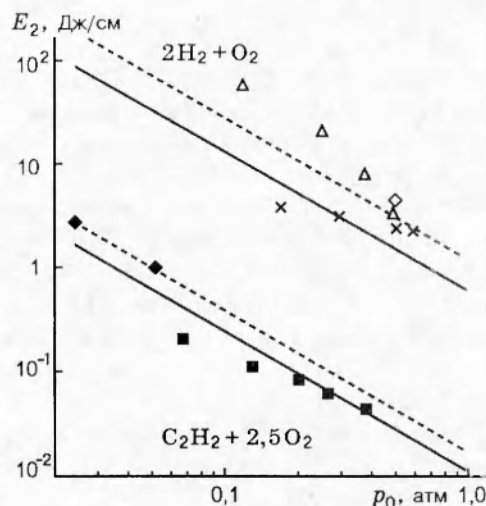


Рис. 3. Данные о цилиндрическом инициировании стехиометрических топливно-кислородных смесей (детонация):

водород — Δ [21], \times [22]; ацетилен — \blacksquare [20]; \circ, \blacklozenge — данные автора

на рисунке приведена также расчетная величина из [19], полученная при решении системы нестационарных уравнений газодинамики и химической кинетики.

На рис. 3 приведены данные для случая цилиндрического инициирования ДВ в стехиометрических смесях водорода и ацетилена с кислородом (эксперименты автора и данные работ [20–22]).

Видно, что обе модели (многоточечного инициирования и дифракционного реинициирования) достаточно хорошо предсказывают значения критических энергий инициирования газовых смесей. Следует подчеркнуть, что выбор в качестве определяющего размера величины R_* позволяет не рассматривать в рамках дифракционной оценки внутреннюю многофронтную структуру ДВ (как в модели многоточечного инициирования) и остаться в рамках одномерных представлений ДВ.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 97-01-01073).

ЛИТЕРАТУРА

1. Benedick W. B., Guirao C. M., Knystautas R., Lee J. H. Critical charge for direct initiation of detonation in gaseous fuel-air mixtures // Dynamics of Explosion / I. R. Bowen, J.-C. Leyrer, R. I. Soloukhin (Eds). (Progress in Astronau-

- tics and Aeronautics; V. 106). New York, 1986. P. 181–202.
2. **Васильев А. А., Григорьев В. В.** Критические условия распространения газовой детонации в резкорасширяющихся каналах // Физика горения и взрыва. 1980. Т. 16, № 5. С. 117–125.
 3. **Васильев А. А.** Оценка энергии инициирования цилиндрической детонации // Физика горения и взрыва. 1978. Т. 14, № 3. С. 154–155.
 4. **Васильев А. А., Николаев Ю. А., Ульяницкий В. Ю.** Критическая энергия инициирования многофронтной детонации // Физика горения и взрыва. 1979. Т. 15, № 6. С. 94–104.
 5. **Васильев А. А.** Околокритические режимы газовой детонации: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Новосибирск, 1995.
 6. **Васильев А. А., Валишев А. А., Васильев В. А.** Взрывоопасность газообразных топлив // 4-я Междунар. конф. «Лаврентьевские чтения по математике, механике и физике». Казань, 1995.
 7. **Ждан С. А., Митрофанов В. В.** Простая модель для расчета энергии инициирования гетерогенной и газовой детонации // Физика горения и взрыва. 1985. Т. 21, № 6. С. 98–103.
 8. **Зельдович Я. Б., Когарко С. М., Симон Н. Н.** Экспериментальное исследование сферической газовой детонации // Журн. техн. физики. 1956. Т. 26, № 8. С. 1744–1768.
 9. **Митрофанов В. В., Солоухин Р. И.** О дифракции многофронтной детонационной волны // Докл. АН СССР. 1964. Т. 159, № 5. С. 1003–1006.
 10. **Knystautas R., Lee J. H., Guirao C. M.** The critical tube diameter for detonation failure in hydrocarbon-air mixtures // Combust. Flame. 1982. V. 48. P. 63–83.
 11. **Васильев А. А.** Критические условия инициирования цилиндрической многофронтной детонации // Физика горения и взрыва. 1998. Т. 34, № 2. С. 114–120.
 12. **Vasil'ev A. A.** Gaseous fuels and detonation hazards // Combustion and Detonation: Proc. 28th Int. Conf. of Fraunhofer Institute of Chemical Technologies. Karlsruhe, Germany, 1997. P. p50.1–p50.14.
 13. **Васильев А. А., Николаев Ю. А.** Модель ячейки многофронтной газовой детонации // Физика горения и взрыва. 1976. Т. 12, № 5. С. 744–754.
 14. **Freiwald H., Koch H. W.** Spherical detonation on acetylene-oxygen-nitrogen mixtures as a function of nature and strength of initiation // 9th Symp. (Intern.) on Combustion. The Combustion Inst., 1963. P. 275–281.
 15. **Когарко С. М., Адушкин В. В., Лямин А. Г.** Исследование сферической детонации газовых смесей // Научно-технические проблемы горения и взрыва. 1965. № 2. С. 22–34.
 16. **Bull D. C., Elsworth I. E., Hooper G.** Initiation of spherical detonation in hydrocarbon-air mixtures // Acta Astronaut. 1978. V. 5. P. 997–1008.
 17. **Knystautas R., Guirao C., Lee J. H., Sulmistras A.** Measurement of cell size in hydrocarbon-air mixtures and predictions of critical tube diameter, critical initiation energy, and detonation limits // Dynamics of Shock Waves, Explosions, and Detonations / I. R. Bowen, N. Manson, A. K. Oppenheim, and R. I. Soloukhin (Eds). (Progress in Astronautics and Aeronautics; V. 94). New York, 1983. P. 23–37.
 18. **Макеев В. И., Гостинцев Ю. А., Строганов В. В. и др.** Горение и детонация водородновоздушных смесей в свободных объемах // Физика горения и взрыва. 1983. Т. 19, № 5. С. 16–18.
 19. **Левин В. А., Марков В. В., Осинкин С. Ф.** Иницирование детонации в водородо-воздушной смеси взрывом сферического заряда ТНТ // Физика горения и взрыва. 1995. Т. 31, № 2. С. 91–95.
 20. **Lee J. H., Matsui H.** A comparison of the critical energies for direct initiation of spherical detonations in acetylene-oxygen mixtures // Combust. Flame. 1977. V. 28. P. 61–66.
 21. **Lee J. H.** Initiation of gaseous detonation // Ann. Rev. Phys. Chem. 1977. V. 28. P. 75–104.
 22. **Lee J. H., Ramamurthi K.** On the concept of the critical size of a detonation kernel // Combust. Flame. 1976. V. 27. P. 331–340.

*Поступила в редакцию 27/III 1997 г.,
в окончательном варианте — 14/VII 1997 г.*