

Г. Л. Агафонов, С. М. Фролов

РАСЧЕТ ПРЕДЕЛОВ ДЕТОНАЦИИ ГАЗОВЫХ ВОДОРОДСОДЕРЖАЩИХ СМЕСЕЙ

В работе предпринято систематическое исследование возможностей одномерной теории пределов детонации на примере водородсодержащих смесей. Рассмотрение проведено на основе детальной схемы окисления водорода. Показано, что одномерная теория дает удовлетворительный прогноз пределов детонации в зависимости от состава, начальных температуры и давления, типа и содержания инертного разбавителя.

Известно [1], что вблизи пределов структура детонационной волны (ДВ) претерпевает изменение: происходит переход от многофронтной конфигурации к спиновой. Этот переход наблюдается в достаточно узком диапазоне объемного содержания горючего в смеси [2] и может трактоваться как предел стационарной самоподдерживающейся детонации [3]. Существуют и другие подходы к определению предела [4].

До настоящего времени все попытки создания теории пределов основывались на квазиодномерном приближении: реальную структуру волны заменяли осредненным течением с «внешними воздействиями». В модели [5, 6] в качестве таковых рассматриваются трение потока за ДВ о стенку канала и теплообмен со стенкой. В модели [7—9] внешнее воздействие представлено расширением трубки тока, вызванным формированием пристеночного пограничного слоя за лидирующим фронтом ДВ. Внешние воздействия приводят к потерям импульса и (или) энергии в зоне реакции ДВ. С уменьшением гидравлического диаметра канала относительные потери возрастают. При некотором диаметре стационарное решение задачи о распространении ДВ исчезает, наступает предел детонации.

В [6] показано, что модель [5] с уточненными коэффициентами трения и теплоотдачи дает удовлетворительный прогноз пределов детонации для ряда топливно-воздушных и топливно-кислородных смесей. При этом в [6] процессы химического превращения в ДВ моделировались одноступенчатой реакцией с эффективными кинетическими параметрами, получаемыми на основе эмпирических данных по задержкам самовоспламенения исследуемых смесей.

Модель [7], в дальнейшем развитая в [9] с учетом детальной кинетики окисления топлива, приводит к корректным качественным результатам, но дает существенные количественные расхождения с измеренными значениями предельных параметров ДВ в водородно-кислородных смесях [10].

Создание многомерной теории пределов представляется весьма сложной задачей ввиду необходимости учета взаимодействия поперечных волн с пристеночным пограничным слоем и других сопутствующих эффектов (отрыв пограничного слоя, неоднородная турбулентность, очаговое самовоспламенение). Результаты [6] показывают, что одномерное приближение можно успешно использовать для расчета пределов при условии учета неустановившегося характера процессов обмена количеством движения и энергией в зоне реакции ДВ. Дальнейшее развитие теории [5, 6] состоит в последовательном учете химико-кинетических закономерностей высокотемпературного окисления горючего в ДВ.

В данной работе проведено систематическое исследование возможностей одномерной теории пределов детонации на примере водородсодержащих смесей. В дополнение к [6] рассмотрение проведено на основе детальной кинетической схемы окисления водорода.

Постановка задачи

Рассмотрим распространение плоской стационарной ДВ в канале гидравлического диаметра d , заполненном газовой реагирующей смесью при температуре T_0 и давлении p_0 . Примем следующие упрощающие допущения:

1) течение за ДВ одномерное;

2) структура ДВ соответствует модели Зельдовича — Неймана — Деринга;

3) реагирующая смесь подчиняется уравнению состояния идеального газа;

4) изменение параметров течения в поперечном сечении потока учитывается с помощью коэффициентов трения и теплоотдачи на стенках канала;

5) коэффициенты трения и теплоотдачи связаны аналогией Рейнольдса;

6) эффекты излучения пренебрежимо малы;

7) скорость химических реакций однородна по сечению канала. Последнее допущение наиболее грубое. Реальному течению даже в отсутствие поперечных волн присуще распределение статической температуры в сжимаемом пограничном слое [11]. Можно надеяться, что вследствие малости длины зоны реакции [6] влияние указанного эффекта невелико.

Математическая формулировка задачи в системе координат, связанной с лидирующим фронтом ДВ, включает следующие уравнения: неразрывности

$$\frac{d\rho u}{dx} = 0, \quad (1)$$

сохранения количества движения

$$\frac{d}{dx} (p + \rho u^2) = \frac{4\sigma}{d}, \quad (2)$$

сохранения энергии

$$\rho u \frac{d}{dx} \left[\frac{u^2}{2} + \left(\sum_{i=1}^N H_i c_i \right) / \rho \right] = \frac{4\sigma D}{d} - \frac{4\theta}{d}, \quad (3)$$

неразрывности для компонентов

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_i u}{dx} &= \chi_i \rho_i, \\ \chi_i &= \sum_{j=1}^m \beta_{ij} r_j, \\ r_j &= k_f \prod_{i=1}^N c_i - k_r \prod_{i=1}^N c_i, \\ \rho_i &= c_i \rho \end{aligned} \quad (4)$$

и состояния

$$p = \sum_{i=1}^N c_i R T.$$

Для замыкания задачи используются дополнительные соотношения [6]: напряжение трения на стенке канала

$$\sigma = \zeta \rho (D - u)^2 / 2, \quad \zeta = \frac{0,3164}{\text{Re}(0)^{0,25}}, \quad (5)$$

тепловой поток в стенку канала

$$\theta = \frac{1}{2} \zeta \rho (D - u) \left[c_p (T - T_0) + \frac{(D - u)^2}{2} \right], \quad (6)$$

$$\text{Re}(0) = \rho(0) [D - u(0)] d / \eta(0),$$

$$\eta(0) = 26,7 \cdot 10^{-7} [\mu(0) T(0)]^{0,5} / \sigma_m(0)^2.$$

Механизм окисления водорода

Реакция	Параметры константы скорости реакций					
	прямой			обратной		
	lg A	n	E	lg A	n	E
0. $H_2 + O_2 = OH + OH$	13,24	0	48,1	10,82	0,3	29,2
1. $OH + H_2 = H_2O + H$	8,00	1,6	3,30	8,66	1,6	18,57
2. $H + O_2 = OH + O$	17,08	-0,9	16,52	13,25	0	0
3. $O + H_2 = OH + H$	7,18	2,0	7,55	3,69	2,8	3,88
4. $O + H_2O = OH + OH$	10,18	1,1	17,26	9,18	1,1	0
5. $H + H + M = H_2 + M$	17,81	-1,0	0	18,77	-1,1	104,4
6. $H + O_2 + M = HO_2 + M$	17,85	-0,8	0	19,06	-1,2	48,41
7. $OH + H + M = H_2O + M$	21,92	-2,0	0	15,11	0	105,1
8. $HO_2 + H_2 = H_2O_2 + H$	13,48	0	26,03	13,68	0	7,95
9. $HO_2 + HO_2 = H_2O_2 + O_2$	12,26	0	0	13,73	0	39,74
10. $H + HO_2 = OH + OH$	14,40	0	1,9	13,08	0	40,1
11. $H + HO_2 = H_2O + O$	13,15	0	2,08	12,74	0	57,53
12. $H + HO_2 = H_2 + O_2$	13,82	0	2,13	14,16	0	56,64
13. $O + HO_2 = OH + O_2$	13,24	0	-0,4	13,35	0	52,66
14. $OH + HO_2 = H_2O + O_2$	13,48	0	0	14,60	0	73,0
15. $OH + OH + M = H_2O_2 + M$	24,76	-3,0	0	33,11	-4,9	53,25
16. $HO_2 + H_2 = H_2O + OH$	11,78	0	18,68	11,44	0	73,74
17. $HO_2 + H_2O = H_2O_2 + OH$	13,40	0	32,29	13,06	0	1,76
18. $H + H_2O = H_2O + OH$	13,38	0	3,97	14,06	0	79,19
19. $OH + M = O + H + M$	15,38	0	99,36	18,67	-1,0	0
20. $O + O + M = O_2 + M$	13,28	0	-1,79	18,26	-1,0	118,1

Граничные условия на лидирующем фронте ДВ определяли из решения уравнения сохранения:

$$\rho(0) u(0) = \rho_0 D,$$

$$p(0) + \rho(0) u(0)^2 = p_0 + \rho_0 D^2,$$

$$\frac{1}{\rho(0)} \sum_{i=1}^N H_i(0) c_i(0) + u(0)^2/2 = \frac{1}{\rho_0} \sum_{i=1}^N H_{i0} c_{i0} + D^2/2,$$

$$T(0) = p(0)/\rho(0) R,$$

$$c_i(0) = c_{i0}.$$

Другое граничное условие — непрерывность интегральной кривой [12] при переходе через особую точку уравнений (1)–(4), точку Чепмса — Жуге (CJ), в которой скорость течения равна местной скорости звука. Дальнейшее поведение интегральной кривой в сверхзвуковой области течения не оказывает влияния на структуру зоны реакции ДВ. Исключением являются случаи с большим недогоранием смеси в зоне реакции [13].

При записи уравнений и дополнительных соотношений приняты следующие обозначения: x — расстояние от лидирующего фронта ДВ; D — скорость ДВ; ρ — плотность; u — скорость; p — давление; m — количество реакций; N — количество химических компонентов, участвующих в реакциях; величины с индексом i относятся к i -му компоненту, причем c_i — мольная концентрация, H_i — энтальпия, включающая химическую часть, μ_i — молекулярная масса; β_{ij} — стехиометрический коэффициент в i -й реакции; k_f и k_r — константы скорости прямой и обратной реакций; σ — напряжение трения на стенке канала; ζ — коэффициент сопротивления; θ — тепловой поток в стенку; Re — число Рейнольдса; c_p — теплоемкость при постоянном давлении; η — динамическая вязкость; σ_m — радиус «молекулы» смеси в модели твердых сфер; параметры с индексом 0 относятся к исходной смеси.

В силу неустановившегося характера течения в зоне за лидирующим фронтом ДВ коэффициент трения существенно отличается от случая установившегося течения в трубе, возникающего после смыкания пограничных слоев. В [14] показано, что использование соотношения

$$\sigma = (\zeta/8) \rho (D - u)^2 \quad (7)$$

в одномерной модели ДВ [15] занижает потери импульса (здесь ζ — коэффициент гидравлического сопротивления канала). Вместо (7) следует применять выражение

$$\sigma \approx (\zeta/2) \rho (D - u)^2. \quad (8)$$

Справедливость (8) доказана в [14] путем сравнения расчетов по одномерной теории затухания ударной волны в канале и экспериментальных результатов. В (5) для расчета ζ используется формула Блазиуса, которая применима при $Re \leq 10^5 \div 10^6$ [16].

В данной работе исследуется детонация водородсодержащих смесей. Наиболее полная схема окисления водорода [17] содержит 60 газофазных реакций (прямых и обратных) и 4 гетерогенные реакции обрыва цепи. В условиях ДВ ряд элементарных стадий в схеме [17] может быть опущен без заметного влияния на процесс.

В табл. 1 приведена схема окисления водорода, используемая в работе ($m = 21$) и составленная в соответствии с рекомендациями [18, 19]. Константы скорости реакций k_f и k_r записывали в виде

$$k = AT^n \exp(-E/RT), \quad (9)$$

где E — энергия активации реакции, ккал/моль; A — предэкспонент, выраженный в см, моль, с; n — числовой коэффициент.

Метод решения

Перед совместным решением уравнений (1)—(4) проведены отладочные кинетические расчеты по схеме табл. 1 с $m = 21$. Расчеты периода индукции воспламенения для условий, соответствующих химическому пику в ДВ, хорошо согласуются с расчетами [20, 21] для водородовоздушных смесей ($N = 9$) и с экспериментами [22] для водородокислородных смесей ($N = 8$).

Систему обыкновенных дифференциальных уравнений (1)—(4) с дополнительными соотношениями (5), (6) и граничными условиями решали численно методом Гира [23].

Скорость детонации D — это собственное значение задачи. Определяющими являются следующие параметры: T_0 , p_0 , d , c_{i0} , N и m . Включение величин N и m подразумевает возможность использования укороченных схем окисления топлива при выбранных кинетических коэффициентах. Указанные параметры определяют область существования стационарных решений поставленной задачи:

$$D_i \leq D < D_{cl}. \quad (10)$$

В (10) учтен тот факт, что в широких трубах D_{cl} не является асимптотикой решения [15]. Величина D_i называется предельной скоростью стационарной ДВ. Аналогично определяющие параметры, при которых достигается предел, называются предельными. Подчеркнем, что D , вообще говоря, неоднозначная функция определяющих параметров [12, 13], поэтому в (10) учитываются лишь устойчивые (в смысле [12, 13]) решения.

Процедура отыскания решения сводилась к поиску такого значения D , при котором интегральная кривая непрерывно переходит из дозвуковой области течения в сверхзвуковую. Если за начальное приближение для D принимается термодинамическая скорость детонации D_{cl} , то после окончания энерговыделения интегральная кривая еще находится в дозвуковой области. Это означает, что при заданном D энерговыделение за счет химического

превращения и мощность сил трения недостаточны для ускорения потока до скорости звука.

При уменьшении D достигается ситуация, когда в звуковой точке интегральная кривая претерпевает разрыв: градиенты термодинамических параметров и скорости бесконечны. Физически это обусловлено тем, что дозвуковой поток за фронтом ДВ ускоряется как за счет экзотермической реакции, так и за счет трения на стенке. В звуковой точке подвод энергии к потоку продолжается, что препятствует переходу к сверхзвуковому течению.

Собственное значение задачи ищется методом пристрелки. Суть его заключается в последовательном приближении к искомому собственному значению путем деления пополам интервала значений D , на концах которого наблюдается такое качественно отличающееся поведение интегральной кривой. Погрешность определения собственного значения D , принятая в расчетах, равна 0,05 %.

Результаты расчетов

Предельный диаметр детонации. На рис. 1—4 показаны результаты расчетов зависимости предельного диаметра d_i детонации водородсодержащих смесей от состава, начальной температуры, типа и процентного содержания инертного разбавителя, начального давления.

Из рис. 1, 2 следует, что расчетная зависимость предельного диаметра детонации от содержания водорода имеет U-образную форму: наблюдается удовлетворительное качественное и количественное согласие расчетных результатов с экспериментальными данными; эмпирический критерий предела $d_i = \lambda/\pi$ в целом согласуется с одномерной теорией пределов; одномерная теория с детальной кинетикой окисления водорода предсказывает сужение пределов детонации при уменьшении начальной температуры.

Данные рис. 3 показывают, что в ряду Ag, He, N₂ наилучшим эффектом для подавления детонации рассмотренной смеси путем разбавления обладает N₂, а наихудшим — Ag. Основной эффект в сужении пределов детонации при разбавлении смеси азотом связан с меньшим отношением теплоемкостей N₂ по сравнению с Ag и He (Ag и He имеют одинаковое отношение теплоемкостей и существенно разные молекулярные массы, однако их эффективности в сужении пределов детонации близки); наблюдается удовлетворительное согласие теоретических и измеренных результатов по влиянию инертных разбавителей на пределы. Из рис. 4 видно, что зависимость $d_i(p_0)$ для стехиометрической смеси монотонна в диапазоне $p_0 = 0,03 \div 0,3$ МПа, тогда как для бедных смесей наблюдается два экстремума: минимум и максимум. Из данных рис. 4 следует, что при фиксированном начальном давлении предельный диаметр монотонно возрастает по мере обеднения смеси горючим; для смеси с 20 % H₂ предельный диаметр практически не зависит от начального давления (в указанном диапазоне давлений); для состава с 17 % H₂ существует диапазон начального давления, в котором наблюдается anomальное поведение зависимости $d_i(p_0)$, т. е. предельный диаметр возрастает с ростом начального давления.

Причина anomального поведения кривых — немонотонная зависимость периода индукции воспламенения водородсодержащих смесей от давления [32]. Для иллюстрации проведены расчеты зависимости периода индукции в стехиометрической водородовоздушной смеси от давления при фиксированной начальной температуре ($T = 1200$ К). На рис. 5 показаны результаты расчетов. Видно, что период индукции τ_i монотонно уменьшается с ростом начального давления вплоть до $p_0 \approx 0,6$ МПа. При дальнейшем увеличении давления величина τ_i возрастает, достигая максимума при $p_0 \approx 3$ МПа.

Для сравнения на рис. 5 показаны результаты расчетов по укороченным кинетическим схемам. Кривая 2 соответствует схеме из 5 прямых реакций 0—3, 6 ($m = 5, N = 8$). Кривая 3 построена на основе схемы окисления водорода при низких давлениях, включающей 4 прямые реакции 0—3 и не учитывающей реакцию обрыва цепи 6 ($m = 4, N = 5$). Сопоставление кривых

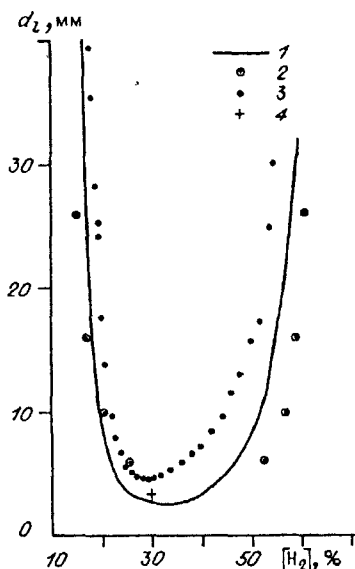


Рис. 1. Зависимость предельного диаметра трубы от состава при детонации водородовоздушных смесей при $T_0 = 298$ К, $p_0 = 0,1$ МПа.

1 — расчет ($m = 21, N = 9$); 2 — прямые измерения [10]; 3, 4 — расчет по эмпирическому критерию $d_l = \lambda/\pi$ при λ из [24] (3) и [25] (4).

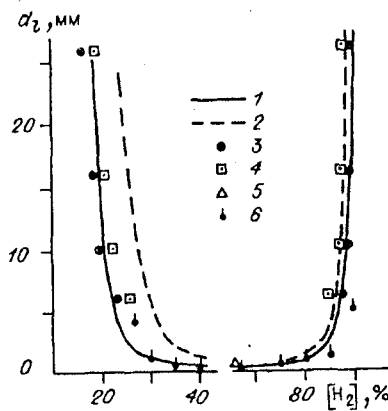


Рис. 2. Влияние состава и начальной температуры на предельный диаметр детонации водородокислородной смеси при $p_0 = 0,1$ МПа.

1, 2 — расчеты при $m = 21, N = 8, T_0 = 298$ (1) и 135 К (2); 3 — прямые измерения [10] при $T_0 = 298$ К; 4 — прямые измерения [10] при $T_0 = 135$ К; 5, 6 — расчет по эмпирическому критерию $d_l = \lambda/\pi$ при $T_0 = 298$ К, λ из [26] (5) и [27] (6).

показывает, что при $p_0 > 0,4 \div 0,5$ МПа пренебрежение реакциями рекомбинации типа реакции б в табл. 1 недопустимо; экстраполяция эмпирических корреляций для задержки самовоспламенения в область давлений, характерных для ДВ, приводит к неверным результатам; использование укороченных схем окисления водорода может привести к количественным и качественным отклонениям от расчетных результатов на рис. 1—4.

Структура ДВ. На рис. 6 показаны расчетные профили давления, температуры, концентрации $[H_2]$ и массовой скорости u в зоне реакции ДВ, распространяющейся в смеси 17% H_2 + воздух при $T_0 = 298$ К, $p_0 = 0,1$ МПа, $m = 21, N = 9$. Линии 1 соответствуют параметрам в ДВ при диаметре трубы $d = 43$ мм ($d \approx d_l$), 2 — для волны, распространяющейся по трубе с $d = 100$ мм. Видно, что с уменьшением d длина зоны индукции возрастает. Это обусловлено увеличением потерь и снижением скорости детонации. На рис. 6, а видна другая особенность структуры ДВ с потерями импульса — рост давления в зоне индукции [13]. На пределе детонации

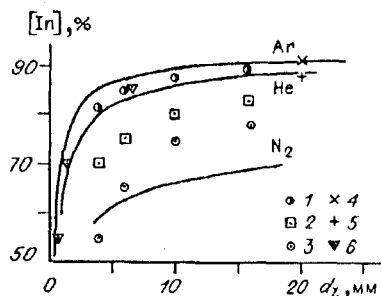


Рис. 3. Влияние типа и концентрации инертного разбавителя на предельный диаметр детонации стехиометрической водородокислородной смеси при $T_0 = 298$ К, $p_0 = 0,1$ МПа. Линии — расчет ($m = 21, N = 9$): 1—3 — интерполяция прямых измерений [28] для Ar (1), He (2), N_2 (3); 4, 5 — прямые измерения [29] для Ar (4), He (5); 6 — расчет по эмпирическому критерию $d_l = \lambda/\pi$ для He при λ из [30].

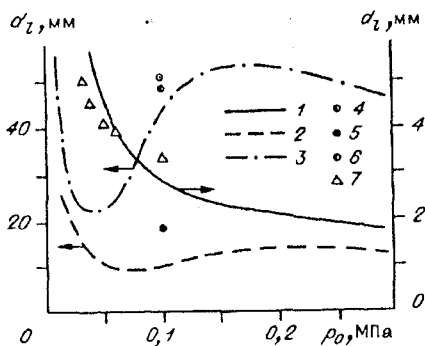


Рис. 4. Влияние начального давления на предельный диаметр водородовоздушных смесей при $T_0 = 298$ К.

Расчет ($m = 21, N = 9$): 1 — для стехиометрической смеси (29,6% H_2), 2 — 20% H_2 , 3 — 17% H_2 ; точки — расчет по эмпирическому критерию $d_l = \lambda/\pi$ при λ из [24] (4 — 17% H_2 , 5 — 20% H_2 , 6 — 29,6% H_2) и [25] (7 — 29,6% H_2).

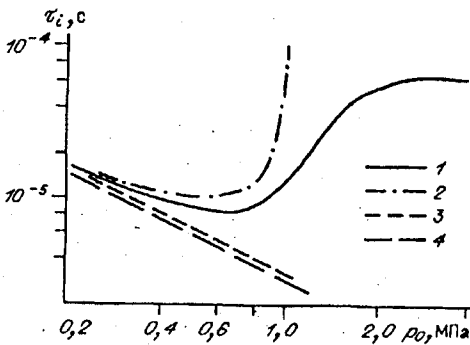


Рис. 5. Зависимость периода индукции самовоспламенения от давления при фиксированной температуре $T = 1200$ К для стехиометрической водородовоздушной смеси.

1–3 – расчет по механизму окисления водорода с 21 (1), 5 (2) и 4 (3) реакциями; 4 – экстраполяция эмпирической зависимости [33] в область высоких давлений ($p < 0,3$ МПа).

максимальная температура в зоне реакции меньше, чем вдали от пределов (рис. 6, б).

Для установления связи между характерными параметрами структуры ДВ построена табл. 2, где для трех смесей (17, 20 и 29,6 % H_2) и разных p_0 приведены расчетные значения предельного диаметра, адиабатического периода индукции τ_i^{ad} , длины зоны индукции $\Delta_i^{ad} = \tau_i^{ad}(0)$ в структуре детонации Чепмена — Жуге, термодинамической скорости детонации D_{CJ} , давления p_s^{ad} и температуры T_s^{ad} на лидирующем фронте ДВ, скорости детонации D , давления p и температуры T , на фронте ДВ с потерями, периода индукции τ_i и длины зоны индукции Δ_i в структуре ДВ с потерями. Указаны также расчетные значения отношений d_l/Δ_i^{ad} и d_l/Δ_i . Расчеты проведены при $T_0 = 298$ К, $m = 21$, $N = 9$.

Данные табл. 2 показывают, что наибольший предельный дефицит скорости детонации по сравнению с D_{CJ} достигается при низком начальном давлении (~ 13 % при $p_0 = 0,01$ МПа для всех указанных смесей). Предельный дефицит снижается при повышенных давлениях (≈ 3 % для бедных смесей и 6 % для стехиометрической смеси при $p_0 = 0,2$ МПа); различие между периодами индукции в структуре околопредельной ДВ и в волне Жуге уменьшается с ростом p_0 (при $p_0 = 0,01$ МПа $\tau_i/\tau_i^{ad} = 6 \div 6,5$, при $p_0 = 0,2$ МПа $\tau_i/\tau_i^{ad} = 2 \div 3$ для бедных смесей и 4,5 для стехиометрической смеси); имеется различие между начальными давлениями, при которых τ_i^{ad} и τ_i достигают минимума для стехиометрической смеси ($p_0 = 0,3$ МПа для τ_i^{ad} и $p_0 = 0,2$ МПа для τ_i); в околопредельных ДВ температура на ударном фронте намного более чувствительна к начальному давлению, чем в волне Жуге, эта чувствительность проявляется заметнее при низких p_0 ; отношение между рассчитанным предельным диаметром ДВ и длиной адиабатической зоны индукции зависит от начального давления и состава смеси, причем $d_l \approx (5 \div 19) \Delta_i^{ad}$; отношение между рассчитанным предельным диаметром ДВ и длиной зоны индукции на пределе зависит от начального давления и состава смеси, причем $d_l \approx (2 \div 6) \Delta_i$.

В литературе часто используют зависимость типа [2] $\lambda = B\Delta_i^{ad}$, где B — коэффициент пропорциональности, определяемый из эвристических соображений ($B = 10 \div 10^3$ в зависимости от смеси). Принимая во внимание эмпирический критерий $\lambda \approx \pi d_l$, находим, что для бедных водородовоздушных смесей $B = 16 \div 60$.

В табл. 3 приведены расчетные значения длины зоны реакции ДВ Δ для двух смесей при разном начальном давлении и $T_0 = 298$ К, $m = 21$, $N = 9$.

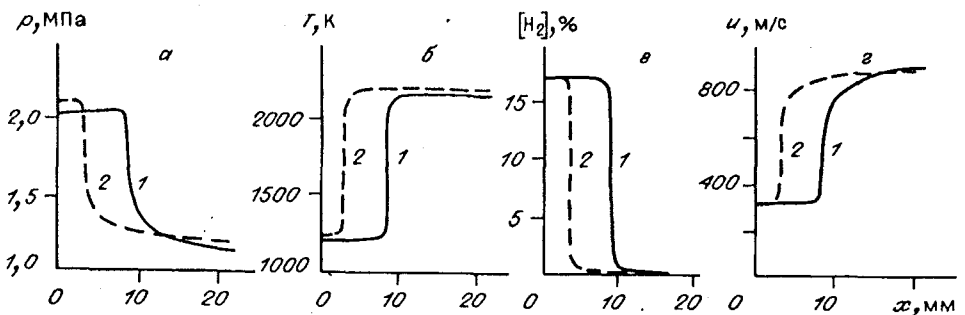


Рис. 6. Расчетные профили p (а), T (б), $[H_2]$ (в) и u (г) в зоне реакции ДВ.

Таблица 2

Расчетные параметры ДВ в водородовоздушных смесях при разных начальных давлениях

[H ₂], %	p ₀ , МПа	d _i , мм	√q ^{ad} , мкс	Δq ^{ad} , мм	D _{CJ} , м/с	p _s ^{ad} , МПа	T _s ^{ad} , К	D, м/с	p _s , МПа	T _s , К	τ _i , мкс	Δ _i , мм	d _i /Δ ^{ad}	d _i /Δ _i
17	0,01	53,4	12,0	4,5	1590	0,208	1239	1377	0,155	1011	77,8	25,1	12,0	2,1
	0,04	21,7	4,4	1,6	1594	0,837	1243	1503	0,743	1143	15,0	4,92	14,0	4,4
	0,1	43,0	10,6	3,5	1595	2,10	1245	1567	2,02	1213	27,0	8,58	12,0	5,0
	0,2	53,0	35,9	11,6	1596	4,20	1246	1560	4,01	1205	76,5	24,1	4,6	2,2
20	0,02	19,8	3,9	1,5	1695	0,459	1329	1485	0,350	1098	23,7	8,1	13,0	2,4
	0,07	9,4	1,6	0,60	1702	1,62	1337	1610	1,44	1233	5,65	1,9	16,0	4,9
	0,1	10,1	1,5	0,57	1704	2,32	1339	1645	2,16	1272	4,89	1,7	18,0	5,9
	0,2	13,5	4,5	1,5	1706	4,65	1342	1665	4,42	1294	12,2	4,0	9,0	3,4
29,6	0,05	4,73	0,71	0,31	1956	1,36	1515	1709	1,03	1240	4,40	1,67	15,0	2,8
	0,1	2,79	0,38	0,17	1971	2,77	1532	1790	2,27	1323	1,92	0,73	16,0	3,8
	0,2	2,07	0,25	0,11	1984	5,61	1548	1867	4,96	1413	1,13	0,43	19,0	4,8
	0,3	1,80	0,24	0,10	1992	8,49	1557	1882	7,56	1430	1,39	0,52	18,0	3,5

Таблица 3

Расчетные длины зоны реакции в ДВ для водородовоздушных смесей

[H ₂], %	p ₀ , МПа	d _i , мм	√q ^{ad} , мкс	Δq ^{ad} , мм	τ _i , мкс	Δ _i , мм	Δ, мм	d _i /Δ ^{ad}	d _i /Δ _i	d _i /Δ	Δ/Δ _i
17	0,01	53,4	12,0	4,5	77,8	25,1	12,0	12,0	2,1	0,44	4,8
	0,04	21,7	4,4	1,6	15,0	4,92	23,3	14,0	4,4	0,93	4,7
	0,1	43,0	10,6	3,5	27,0	8,58	22,8	12,0	5,0	1,9	2,7
	0,2	53,0	35,9	11,6	76,5	24,1	33,9	4,6	2,2	1,6	1,4
29,6	0,1	2,8	0,38	0,17	1,92	0,73	3,9	17,0	3,8	0,72	5,3

Видно, что отношение длины зоны реакции к длине зоны индукции Δ/Δ_i в околопредельной ДВ зависит от начального давления и состава смеси. Это отношение больше при низких p_0 и достигает значения $\Delta/\Delta_i = 5$ при $p_0 = 0,01$ МПа; длина зоны реакции в околопредельной ДВ близка по величине к предельному диаметру детонации, причем $d_i \approx (0,5-2) \Delta$. Этот вывод подтверждает результаты упрощенного моделирования в [6].

Заключение

Одномерная теория с уточненными потерями дает удовлетворительный прогноз для пределов детонации водородсодержащих смесей в зависимости от состава, начальных температуры и давления, типа и содержания инертного разбавителя и в целом согласуется с эмпирическим критерием, связывающим предельный диаметр и ширину ячейки многофронтной детонации.

Учет реакции рекомбинации в условиях ДВ приводит к немонотонной зависимости предельного диаметра от начального давления; расчетная предельная длина зоны реакции в одномерной структуре ДВ и предельный диаметр детонации близки по величине.

Таким образом, в отличие от размера ячейки λ предельный диаметр d_i может быть рассчитан из одномерной модели ДВ. Это позволяет использовать d_i как расчетный параметр, отражающий чувствительность реагирующей смеси к детонации. Чем больше d_i , тем менее чувствительна смесь при прочих равных условиях. Для водородсодержащих смесей такой подход оправдывает себя. В дальнейшем в рамках описанной модели предполагается исследовать пределы детонации метансодержащих смесей.

Авторы признательны А. Ю. Кушарину и О. Е. Попову за помощь в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Васильев А. А., Митрофанов В. В., Топчян М. Е. Детонационные волны в газах // ФГВ.— 1987.— 23, № 5.— С. 109.
2. Moen I. O., Donato M., Krystautas R. et al. The influence of confinement on the propagation of detonations near the detonability limits // Proc. 18th Symp. (Int.) Combust.— The Combust., 1981.— P. 1615.

3. Dove J. E., Wagner H. Gg. A photographic investigation of the mechanism of spinning detonation // Proc. 8th Symp. (Int.) Combust.— The Combust. Inst., 1962.— P. 589.
4. Manson N., Brochet C., Brossard J. et al. Vibratory phenomena and instability of self-sustained detonations in gases // Proc. 9th Symp. (Int.) Combust.— The Combust. Inst., 1963.— P. 462.
5. Зельдович Я. Б. К теории распространения детонации в газообразных системах // ЖЭТФ.— 1940.—10, вып. 5.— С. 542.
6. Фролов С. М., Гельфанд Б. Е. Предельный диаметр распространения газовой детонации в трубах // ФГВ.— 1991—27, № 1.— С. 116.
7. Fay J. A. Two-dimensional gaseous detonations: velocity deficit // Phys. Fluids.— 1959.—2.— P. 283.
8. Williams F. A. Quenching thickness for detonations // Combust. Flame.— 1976.—26.— P. 403.
9. Somerjian G., Dove J. E. Predictions of pressure and composition limits for confined hydrogen — oxygen detonations // Proc. 1st Spec. Meet. (Int.) of the Combust. Inst.— Univ. de Bordeaux, France.— 1981.— P. 455.
10. Pawel D., Vasatko H., Wagner H. Gg. The influence of temperature on the limits of detonability // Report AF EOAR 67—49.— Inst. für Physikalische Chemie, Göttingen.— 60 p.
11. Wolanski P. Influence of non-isentropic processes on transition from deflagration to detonation in combustible mixtures // Archivum Combustionis.— 1991.—11, N 3/4.— P. 143.
12. Зельдович Я. Б., Компанец А. С. Теория детонации.— М.: Гостехиздат, 1955.— 268 с.
13. Фролов С. М., Поленов А. Н., Гельфанд Б. Е. и др. Особенности детонации в системах с произвольными потерями // Хим. физика.— 1986.—5, № 7.— С. 978.
14. Gelfand V. E., Frolov S. M., Nettleton M. A. Gaseous detonations — a selective review // Prog. Energy Combust. Sci.— 1991.—17.— P. 327.
15. Николаев Ю. А. Теория детонации в широких трубах // ФГВ.— 1979.—15, № 3.— С. 142.
16. Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа.— М.: Наука, 1973.—736 с.
17. Димитров В. И. Простая кинетика.— Новосибирск: Наука, 1982.—382 с.
18. Baulch D. L., Drysdale D. D., Horne D. G. et al. Evaluated kinetic data for high temperature reactions.— Leeds: Leeds Univ. Publ., 1973.—433 p.
19. Warnatz J. Combustion chemistry/Ed. by W. C. Gardiner.— Berlin: Springer-Verlag, 1984.
20. Westbrook C. K. Hydrogen oxydation kinetics in gaseous detonations // Comb. Sci and Techn.— 1982.—29, N 1/2.— P. 67.
21. Atkinson R., Bull D. C., Shuff P. J. Initiation of spherical detonation in H₂ — air // Combust. Flame.— 1980.—39, N 3/4.— P. 287.
22. Just T., Luig F. T., Wagner H. Gg. Untersuchung der Reactionzone von Detonationen in Knallgas verschiedener Zusammensetzung // Bericht. Bunsen. Phys. Chem.— 1961.—65, H. 5.— S. 403.
23. Полак Л. С., Гольденберг М. Я., Левицкий А. А. Вычислительные методы в химической кинетике.— М.: Наука, 1984.
24. Knystautas R., Guirao C. et al. Measurement of cell size of hydrocarbon — air mixtures and prediction of critical tube diameter, critical initiation energy, and detonability limits // Dynamics of Shock Waves, Explosions and Detonations/ed. by J. R. Bowen, N. Manson, A. K. Oppenheim, and R. I. Soloukhin // Progr. in Astron. Aeron. N. Y.: AIAA Inc.— 1984.—94.— P. 23.
25. Dull D. C., Elsworth J. E., Shuff P. J. et al. Detonation cell structure in fuel/air mixtures // Combust. Flame.— 1982.—45.— P. 7.
26. Манжалеи В. И., Митрофанов В. В., Субботин В. А. Измерение неоднородностей детонационного фронта в газовых смесях при повышенных давлениях // ФГВ.— 1974.—10, № 1.— С. 102.
27. Бохан Ю. А., Шуленин Ю. В. Минимальная энергия инициирования сферической газовой детонации некоторых смесей водорода // Докл. АН СССР.— 1979.—245, № 3.— С. 623.
28. Pusch W., Wagner H. Gg. Einfluss des Rohrdurchmessers auf die Ausbreitung einer Detonation in explosiblen Gasgemischen. T. I: Inertgas- und Rohrdurchmessereinfluss auf die Detonationsgrenzen einiger explosibler Gasgemische // Ber. Bunsen. Phys. Chem.— 1965.—69, H. 6.— S. 503.
29. Gordon W. E., Mooradian A. J., Harper S. A. Limit and spin effects in hydrogen — oxygen detonations // Proc. 7th Symp. (Int.) on Combust.— The Combust. Inst., 1960.— P. 752.
30. Kumar R. K. Detonation cell width in hydrogen — oxygen — diluent mixtures // Combust. Flame.— 1990.—80, N 2.— P. 157.
31. Фролов С. М., Гельфанд Б. Е., Цыганов С. А. Влияние вдува массы на характеристики взрывных процессов/АН СССР. ОИХФ.— Черногловка, 1991.—64 с.
32. Oran E. S., Boris J. P. Weak and strong ignition. 2. Sensitivity of the hydrogen — oxygen system // Combust. Flame.— 1982.—48.— P. 149.
33. Schott G. L., Kinsey J. L. Kinetic studies of hydroxyl radicals in shock waves. 2. Induction times in the hydrogen — oxygen reaction // J. Chem. Phys.— 1958.—29, N 5.— P. 1177.

117977, Г. Москва,
Институт химической физики
им. Н. Н. Семенова РАН

Поступила в редакцию 5/IV 1993,
после доработки — 7/VII 1993