

С.Н. МЕДВЕДЕВ, С.М. ФРОЛОВ¹

Московский инженерно-физический институт (государственный университет)

¹Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРЕДЕЛОВ ДЕТОНАЦИИ ВОДОРОДСОДЕРЖАЩИХ СМЕСЕЙ И ИНГИБИРОВАНИЯ ДЕТОНАЦИИ

Методом численного моделирования исследованы концентрационные пределы детонации водородно-воздушных смесей, включая смеси с добавками ингибиторов самовоспламенения.

Известно, что водородные смеси обладают широкими концентрационными пределами горения и детонации. Например, пределы детонации водородно-воздушных смесей таковы: 18,6 %_{об} – концентрация H₂ на бедном пределе и 56 %_{об} – на богатом [1]. Концентрационные пределы зависят от диаметра трубы. В данной работе проведено теоретическое исследование влияния диаметра трубы на концентрационные пределы детонации водородно-воздушных смесей с добавками и без добавок ингибитора самовоспламенения на основе одномерной модели структуры течения в зоне реакции детонационной волны с учетом потерь количества движения и энергии на стенках трубы. Впервые такую задачу в модельной постановке с одноступенчатой химической реакцией решал Я.Б. Зельдович [2]. В [3–5] такую задачу решали численно с применением уточненных данных по коэффициентам потерь количества движения и энергии, а также с учетом детальной кинетики окисления водорода. Влияние ингибиторов самовоспламенения на пределы детонации до сих пор теоретически не исследовалось.

Математическая модель основана на одномерных уравнениях течения за фронтом детонации, дополненных системой кинетических уравнений окисления водорода и реакций ингибитора с радикалами и промежуточными продуктами. Механизм окисления водорода включал 21 реакцию и 9 компонентов. Параметры термодинамически равновесных продуктов реакции сравнивались с результатами экспериментов и расчетов по программе TDS 3.08.

Роль ингибитора самовоспламенения (ненасыщенный углеводород с двойной связью) сводилась к связыванию свободного атома водорода и обрыву цепи с дальнейшей регенерацией ингибитора и образованием менее активного радикала HO_2 . Добавление ингибитора водородно-воздушную смесь приводило к увеличению задержек воспламенения и сужению пределов детонации.

Авторы признательны В.В. Азатыану за полезные замечания при обсуждении работы и предоставление кинетического механизма ингибирования окисления водорода.

Список литературы

1. Льюис Б., Эльбе Г. Горение пламя и взрывы в газах.- «Мир».- Москва 1968.- 591 с.
2. Я. Б. Зельдович. ЖЭТФ, 1940, 10, 5, с. 542.
3. Я. Б. Зельдович, Б. Е. Гельфанд, А. А. Борисов, С. М. Фролов, А. Н. Поленов. Хим. Физика, 1985, 4, 2, с. 279.
4. Я. Б. Зельдович, Б. Е. Гельфанд, Я.М. Каждан, С.М. Фролов. ФГВ, 1987, 4, 2, с. 103.
5. Г. Л. Агафонов, С. М. Фролов, ФГВ, 1994, 1, с. 92.