

этих топлив. В таком случае детальные кинетические механизмы этих компонентов с учетом экспериментальных данных по задержкам воспламенения модельных или суррогатных смесей позволяют получать упрощенные механизмы энерговыделения. Полученные таким образом кинетические механизмы без особых принципиальных трудностей могут быть включены в математическую модель, описывающую переход горения в детонацию. Это один из примеров результативного совмещения компьютерного и экспериментального моделирования.

Другой пример комплексного моделирования — разработка научных основ одностадийной некаталитической конверсии попутных нефтяных газов (ПНГ) в синтез-газ. Проблема заключается в том, что в одностадийной конверсии ПНГ в режимах самовоспламенения используемое сырье не имеет стандартного состава. Состав ПНГ в реальных условиях зависит от месторождения нефти, времени года и степени сепарации, которой подвергается ПНГ. Ясно, что в этом случае для выяснения основных закономерностей воспламенения ПНГ имеет смысл использовать модельные смеси, т. е. проводить экспериментальное моделирование и выяснять роль основных компонентов в процессе одностадийной конверсии сырья в целевой продукт. Оказывается, что тяжелые фракции углеводородов, хотя и не представляют основную массу сырья, обуславливают области отрицательных температурных коэффициентов, а также могут влиять на состав целевых продуктов и на (нежелательный) выход сажи.

Эти примеры наглядно демонстрируют целесообразность экспериментального моделирования и комплексного использования экспериментального и компьютерного моделирования.

С. М. Фролов

Пределы газовой детонации и перехода горения в детонацию: возможно ли моделирование?

Меня всегда интересовал вопрос: «Если в гладкой трубе заданного диаметра, заполненной газовой взрывчатой смесью заданного состава, можно инициировать самоподдерживающуюся детонацию с помощью сильного источника, означает ли это, что в такой же трубе и в такой же смеси можно получить самоподдерживающуюся детонацию с помощью организации перехода горения в детонацию (ПГД) при использовании слабого источника зажигания?» Ответа на этот вопрос в литературе я не нашел. Между тем, на мой взгляд, это один из ключевых вопросов теории и практики, который тесно связан с нашим пониманием пределов детонации и с существующими канонами техники взрывобезопасности на производстве.

Наши недавние лабораторные исследования детонации воздушных смесей самого «нечувствительного» углеводорода алканового ряда — метана —

показали, что ответ на этот вопрос, скорее всего, утвердительный. Из литературных источников известно, что предельный диаметр гладкой трубы, в которой возможно прямое инициирование детонации метановоздушной смеси при нормальных условиях (например, перепуском детонационной волны из кислородной смеси в воздушную или взрывом активного заряда), составляет 80–100 мм. Этот результат получен многими исследователями (П. Волянским в трубе квадратного сечения 80×80 мм, А. А. Борисовым в круглой трубе диаметром 100 мм и т. д.). Что касается ПГД в такой смеси, то в литературе имеются очень противоречивые данные. С одной стороны, А. А. Васильев сообщает о регистрации ПГД при нормальных условиях в стехиометрической метановоздушной смеси в трубе диаметром 100 мм при использовании специальных турбулизаторов, защищенных патентом. С другой стороны, М. Кузнецов и др. сообщают о том, что в трубе диаметром 121 мм с регулярными кольцевыми препятствиями ПГД в такой смеси возможен только при начальном давлении выше 2 атм. Подразумевается, что в обоих случаях образовавшаяся в результате ПГД детонационная волна способна распространяться в самоподдерживающемся режиме в гладком участке трубы, присоединенном к участку трубы с препятствиями-турбулизаторами. Наши же эксперименты показали, что детонацию стехиометрической метановоздушной смеси при нормальных условиях можно получить через ПГД в круглой трубе диаметром 94 мм. Для этого потребовалось использовать специально спроектированные препятствия-турбулизаторы, обеспечивающие оптимальное согласование темпов ускорения пламени и усиления ударной волны, порожденной пламенем. После ПГД полученная детонационная волна распространялась квазистационарно в длинной гладкой секции трубы в ярко выраженном спиновом (одноголовом) режиме.

По-моему, приведенные примеры показывают, что пределы детонации при сильном инициировании и при ПГД близки или совпадают. Тот факт, что некоторые исследователи не наблюдали ПГД в трубах диаметром ~ 100 мм при нормальных условиях, объясняется применением «неправильных» препятствий-турбулизаторов в своих опытах. Часто бывает, что в результате лабораторного экспериментального моделирования тех или иных физико-химических явлений с использованием ограниченного набора экспериментальных условий авторы приходят к ошибочным или далеко идущим обобщениям, которые затем прочно закрепляются в нашем сознании и, что самое опасное, становятся основой практических и методических правил и рекомендаций.

Мне уже не раз приходилось слышать, что в трубах диаметром 100–120 мм смеси метана с воздухом могут детонировать (в режиме ПГД) только при повышенном давлении 2–3 атм. . . Печально, но такие утверждения тиражируются в научной литературе (недавние публикации группы из НИЦ «Курчатовский институт»). Надо ли объяснять, насколько опасно это заблуждение?

Что касается теоретического моделирования, то оно, как правило (так уж сложилось), всегда подвергается сомнению ввиду разного рода допущений и упрощений. Видимо, поэтому теоретическое моделирование в целом развивается значительно быстрее, чем экспериментальное.

Возвращаясь к вопросу о возможности моделирования пределов газовой детонации и ПГД, поставленном в заголовке моей заметки, я полагаю, что такое моделирование возможно. Поскольку прямое инициирование детонации в гладкой трубе изучать и экспериментально, и теоретически значительно проще, чем ПГД (что требует подбора оптимальной конфигурации препятствий-турбулизаторов), наиболее практичным методом моделирования пределов при ПГД следует считать прямое инициирование детонации. Можно ожидать, что полученные таким методом концентрационные пределы детонации в гладких трубах разного диаметра станут реальной основой правил техники взрывобезопасности на производстве.

Литература

1. Физика взрыва / Под ред. Л. П. Орленко. — 3-е изд., перераб. — В 2 т. — М.: Физматлит, 2002. Т. 1. 832 с.
2. Кук М. А. Наука о промышленных взрывчатых веществах. — М.: Недра, 1980. 453 с.
3. Engelke, R., and S. A. Sheffield. 1998. Initiation and propagation of detonation in condensed-phase high explosives. In: *High-pressure shock compression of solids III*. Eds. Lee Danison, and Mohsen Shahinpoor. New York: Springer-Verlag Inc.
4. Dremin, A. N. 1999. *Toward detonation theory*. New York: Springer-Verlag Inc.
5. Зельдович Я. Б. Теория горения и детонации газов. Ин-т хим. физики — М.—Л.: Изд-во АН СССР, 1944. 72 с.
6. Mallard, E., and H. Le Chatelier. 1881. Sur les vitesses de propagation de l'inflammation dans les mélanges gazeux explosifs. *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences, Paris*. 93:145–48.
7. Mallard, E. 1875. De la vitesse avec laquelle se propage l'inflammation dans un mélange d'air et de grisou. *Annales des mines*. 7-e ser. 7:355–81.
8. Mallard, E., and H. L. Le Chatelier. 1883. Recherches expérimentales et théorétiques sur la combustion des mélanges gazeux explosif. *Annales des Mines*. 8-e ser. 4:296–568.
9. Berthelot, M. 1881. Sur la vitesse de propagation des phénomènes explosifs dans les gaz. *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences, Paris*. 93:18–22.
10. Berthelot, M, 1871. Sur la force des mélanges gazeux détonants. *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences, Paris*. 72:165–68.
11. Bret, P. 1994. Lavoisier à la régie des poudres: Le savant, le financier, l'administrateur et le pédagogue. *La Vie des Sciences, Comptes Rendus de l'Académie des sciences, série générale*. 11(4):297–317.
12. de Lavoisier, A. L. 1789. *Traité élémentaire de chimie*. Paris.
13. Abel, F. A. 1869. Contributions to the history of explosive agents. *Phil. Trans. R. Soc. L*. 159:489–516.