

ЧАСТЬ 4

## ПЛЕНАРНАЯ ДИСКУССИЯ



---

РЕЗУЛЬТАТИВНОСТЬ МОДЕЛИРОВАНИЯ  
ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ И ВЗРЫВА:  
ЭКСПЕРИМЕНТЫ, ТЕОРИЯ, РАСЧЕТ

**А. Ю. Долгобородов**

**К истории «открытия» явления детонации**

Целью настоящей заметки является исправление некоторых ошибок преподавания истории открытия явления детонации. В большинстве современных учебников и монографий по физике взрыва эта история излагается примерно одинаково: «Катастрофические взрывы в угольных шахтах в конце XIX столетия побудили ученых ряда стран заняться детальным исследованием распространения пламени в трубах. Одним из наиболее важных результатов этих работ было открытие в 1881 г. четырьмя французскими учеными (Малляром и Ле Шателье и, независимо от них, Бертелло и Вьелем) явления детонации в газах — распространения горения с равномерной, вполне определенной для каждого горючего состава, сверхзвуковой скоростью порядка 2–3 км/с. Этот быстрый процесс горения был назван «фальшивым горением», или детонацией (от французского *detonner*: фальшивить, звучать не в тон)» [1]. Аналогичное изложение можно найти в работах не только по детонации газов, но и во многих российских и зарубежных изданиях по физике детонации конденсированных взрывчатых веществ (ВВ) (см., например, [2–4]). Сейчас уже трудно установить первичный источник такого изложения истории; по-видимому, одним из первых изданий была книга Я. Б. Зельдовича [5]: «Явление детонации газов было открыто сравнительно поздно, в 1881 г., независимо Малляром и Ле Шателье. а также Бертелло и Вьелем в ходе работ по распространению пламени в трубах по заданию горно-промышленного комитета. Работы эти последовали за ужасными катастрофами в шахтах Франции и Бельгии. Применением фотографического метода было открыто распространение горения с огромной скоростью (от 1,5–2 до 4–5 км/с). Первоначально детонация газовых смесей была открыта при поджигании их зарядом ВВ (гремучей ртути), в то время как поджигание тепловое, искрой или пламенем, вызывает медленное горение смеси...» Однако такое изложение не в полной мере соответствует истине и содержит фактические ошибки.

Сейчас в эпоху Интернета, когда многие научные архивы оцифрованы и доступны для свободного получения информации, нетрудно установить реальную историю на основе оригинальных работ. Рассмотрим научные публикации по детонации в период до 1881 г. включительно. Что же реально было сделано в работе Малляра и Ле Шателье [6], на работу которых, как первую, ссылается Зельдович? Во-первых, название работы — «О скоростях распространения воспламенения во взрывчатых газовых смесях» — соответствует ее содержанию. В работе приведены данные по измерениям скоростей пламен в ряде газовых смесей. Основная масса измерений содержит результаты со скоростями пламен менее 20 м/с. Что же касается детонации, то в работе отмечается, что в случае труб с закрытым концом наблюдается экстремально высокая скорость распространения пламени — «мощная детонация» (*forte détonation*), для водородно-кислородной смеси удалось определить «эффективную» скорость более 1000 м/с, для водородно-воздушной смеси — более 300 м/с. Точных данных, указывающих на стационарность процесса, в работе не приводится. В целом работа имеет характер короткого сообщения и не претендует на то, что авторами было сделано «открытие» явления детонации. Термин «детонирующая смесь» (*mélange détonant*) употреблялся для смесей рудничного газа с воздухом и ранее, например в работе того же Малляра [7]. Для измерений использовался хронограф Дюпре, который позволял производить измерения скоростей на локальных базах измерения. Что же касается упомянутого Зельдовичем «фотографического» метода, то он был использован несколько позднее [8]. Во второй статье (М. Бертло «О скорости распространения взрывных явлений в газе»), опубликованной в том же номере Докладов французской академии наук [9], действительно приведены первые результаты по измерениям скоростей детонации в ряде горючих смесей газов, полученные совместно с П. Вьелем. Опыты проводились в металлической трубке внутренним диаметром 8 мм, длиной 5 м с регистрацией в начале трубы, на расстоянии 2,5 м и в конце трубы. Обнаружена устойчивая детонация со скоростью 2500 м/с в смесях водорода и окиси углерода с кислородом при инициировании процесса подрывом заряда гремучей ртути. При этом Бертло отмечает, что для газов наблюдаются два режима распространения горения, аналогично тому, что существует для твердых ВВ: при простом воспламенении — послойное горение, а при инициировании гремучей ртутью — детонация («La différence entre les deux ordres de combustion paraît analogue à celle qui existe entre l'inflammation simple des matières explosives solides, se propageant par échauffement de proche en proche; et leur détonation subite, provoquée par une amorce fulminante»).

Таким образом, можно констатировать, что хотя в [9] и получены первые результаты по величине скорости и стационарности процесса в газовых смесях, но сам Бертло не претендует на «открытие» детонации как нового физического явления в целом. Тем более что на 10 лет раньше Бертло уже

опубликовал результаты определения теплоты взрыва для ряда «детонирующих» газовых смесей [10].

Теперь перейдем к реальной истории использования термина «детонация» в научной литературе. Кто и когда был первым автором, сейчас, конечно, сложно установить точно, но уже с конца XVIII в. этот термин используется для определения характера взрывных процессов в твердых ВВ. Во Франции в то время проводились активные работы по созданию и исследованию новых ВВ и порохов. В частности, Бертолле (C. L. Berthollet) разработал способ получения хлората калия и перхлората аммония, под руководством Лавуазье (A. L. Lavoisier) разработаны способы очистки селитры и повышения силы черного пороха и т. д. (см. [11]). Одновременно проводятся работы по исследованию горения и детонации различных взрывчатых смесей. Так, в «Трактате по элементарной химии» [12] Лавуазье приводит первые данные по теплоте взрыва смесей нитрата калия с углеродом, по количеству газообразных продуктов при детонации смесей хлората калия с металлами. Во втором томе своего трактата (гл. 7 «О горении», § 8 «О детонации», с. 525) Лавуазье дает такое определение детонации: «Именно этот внезапный переход из плотного (конденсированного) состояния в аэроформное (газообразное) называется детонацией, потому что действительно он сопровождается обычно треском и грохотом» (*C'est ce passage brusque de l'état concret à l'état aériforme qu'on a nommé détonation, parce qu'en effet il est ordinairement accompagné de bruit & de fracas*). По-видимому, это одно из первых определений, которое и использовалось в дальнейших научных работах по исследованию детонации различных веществ.

С появлением новых ВВ в первой половине XIX в. (1800 г. — E. Howard, инициирующие ВВ: гремучая ртуть и гремучее серебро; 1846 г. — C. F. Schönbein, пироксилин (gun-cotton); 1848 г. — A. Sobrero, нитроглицерин; 1859–1861 гг. — Л. Н. Шишков, тринитро- и тетранитрометан; 1863–1867 гг. — A. Nobel, капсуль-детонатор и динамит и др.) работы по исследованию детонации активизировались. В 1864 г. Альфред Нобель отмечает возможность двух режимов горения нитроглицерина в зависимости от мощности инициатора: медленного — дефлаграции — при поджигании и детонации при инициировании гремучей ртутью. Фредерик Абель в 1869 г. публикует результаты исследований инициирования детонации в пироксилине и нитроглицерине, которые позволили сделать вывод об общей закономерности возникновения в твердых ВВ режимов детонации или дефлаграции в зависимости от типа инициирующего импульса [13–15]. В 1870 г. Эндрю Нобл (A. Noble) разрабатывает хронограф, позволяющий измерять скорость процессов с микросекундным временным разрешением, а с 1873 г. Абель публикует цикл работ по результатам исследования возникновения, распространения и передачи детонации в зарядах пироксилина, нитроглицерина и динамита с различными данными по параметрам и зависимостям процесса, в том числе по скоростям детонации (5–6 км/с), отмечена стационарность

процесса, скорость детонации постоянна по длине зарядов и зависит только от плотности ВВ [16, 17].

Таким образом, можно констатировать, что исторически нельзя датировать точное время «открытия» детонации и тем более соотносить с датами публикаций работ по измерению скорости или иных параметров. Правильным будет указать, что в научной литературе термин «детонация» начал использоваться с конца XVIII в., а первые измерения скорости и установление факта стационарности детонационной волны для конденсированных ВВ были опубликованы в 1873–1874 гг. Абелем, а для газовых смесей — в 1881 г. Берглю.

Данная краткая заметка, конечно, не претендует на полноту изложения истории изучения детонации. Более подробно данный вопрос изложен, например, в энциклопедической статье И. М. Чельцова [19] или в статье Н. Мансона [20]. Последняя статья содержит наиболее полную хронологию по истории изучения детонации, но, к сожалению, практически не известна специалистам и мало цитируется. По моему мнению, ее стоит перевести на русский язык и сделать доступной для ознакомления в Интернете.

**А. А. Зенин**

### **Задачи моделирования процессов горения конденсированных материалов**

В настоящее время задачи моделирования процессов горения конденсированных энергетических материалов (КЭМ) можно было бы сформулировать следующим образом.

1. Химико-физические механизмы процессов в газовой и, особенно, в конденсированной фазах.
2. Особенности горения КЭМ в условиях обдува горячей поверхности.
3. Горение КЭМ при пульсирующем давлении.
4. Устойчивость процессов горения КЭМ.

Задачи, очевидно, имеют научно-прикладной характер. Их цель — помочь целенаправленно создавать новые КЭМ и понять, как регулировать процессы горения. В частности, нужно знать особенности горения КЭМ в условиях ракетных камер, в которых обязательно есть обдув (п. 2), пульсации давления (п. 3) и потеря устойчивости горения (п. 4). Предполагается, что происходящие катастрофические взрывы ракет могут быть вызваны этими явлениями.

**Задача 1.** Важные вопросы локализации зон, управляющих скоростью горения КЭМ, в основном, решены. Ниже кратко изложено, что по этому вопросу к настоящему времени установлено и какими методами. Показано, что скоростью горения КЭМ управляют реакции, лимитирующие скорость

тепловыделения в реакционном слое (р.с.) конденсированной фазы (к-фазы), и реакции в узком низкотемпературном слое газа, примыкающем к горячей поверхности. Этот вывод делается, прежде всего, на основании измерений величин тепла, выделяющихся в р.с. к-фазы, и величин тепла, подводимых из газа. Эти измерения показывают, что примерно 90% тепла, необходимого КЭМ'у для нагрева до температуры горячей поверхности, выделяется в р.с. к-фазы. Из газовой фазы подводится около 10% тепла. Этот вывод детализируется получением функций скорости тепловыделения (СТВ), дающих распределение этой скорости по зонам горения. Эти распределения показывают, что в р.с. к-фазы самые высокие величины СТВ в волнах горения. Они на порядок превышают величины СТВ в газе. Распределения позволяют получить функции влияния газовой фазы (ФВГ) на скорость горения КЭВ. Эти функции, в свою очередь, показывают, как распределено это влияние на скорость горения в приповерхностной газофазной зоне.

Все эти результаты получены посредством анализа термопарных записей распределений температур по зонам горения КЭВ (записи получают тонкими термопарами, заделанными в порох, которые при прохождении волны горения дают распределение температуры). Для этого анализа необходимо знать элементарную теорию термопарных измерений в КЭВ. Теория предполагает знание основ теплопроводности, теплообмена и статистической обработки наблюдений. Основным инструментом обработки профилей температур в волне является уравнение теплопроводности в полных производных, связанное со стабильно распространяющейся волной горения. Первый интеграл этого уравнения, полученный интегрированием по к-фазе, дает связь тепловыделения в к-фазе с теплоподводом из газа, т.е. уравнение с двумя неизвестными. Для получения теплоподвода используется градиент температуры в газе у поверхности. Он находится по профилю температуры. Вопрос о надежности определения этого наклона решается анализом теплообмена термопары со средой при выходе термопары из к-фазы в газ. Для этого определяют и используют постоянную времени термопар — характеристику ее тепловой инерционности, зависящей от скорости обдува. Показывается, что она связана простой формулой с коэффициентом теплоотдачи в законе Ньютона, определяющем теплообмен термопары с газовой средой.

Используя баланс тепла термопары при теплообмене в газе со средой, можно перестраивать термопарный профиль в истинный профиль температуры (что всегда делается). Этот анализ показывает, что, выбирая достаточно тонкие термопары, можно с небольшой погрешностью получать профили температур КЭМ даже при давлениях до 10–50 МПа. Зная теплоподвод из газа, по первому интегралу получают тепловыделения в к-фазе горящих КЭМ. Двукратное интегрирование уравнения теплопроводности дает распределение температуры в тепловом слое к-фазы и позволяет установить, что тепловыделение действительно сосредоточено в узком приповерхностном слое к-фазы (т.е. в р.с.). Это распределение температуры дает связь

теплофизических характеристик пороха и является хорошим инструментом анализа (например, для отбраковки неправильно полученных распределений температуры в к-фазе, откуда следует ошибочность измерений и в газе). Установленные закономерности параметров волн горения позволяют детектировать ошибочные записи температур. Измерения температур горячей поверхности при различных скоростях горения позволили установить связи скорости горения с этими температурами и определить эффективные энергии активации процесса перехода к-фазы в газ (закон газификации). Тепловая структура зон горения и их характеристики изучены для различных баллистических порохов и для смесевых составов на основе перхлората аммония, октогена, гексогена, адны, СL-20, с различными пассивными и активными горючесвязующими (типа НТРВ, GАР, ВАМО-АММО, тетрагидрофуран, пластифицированные полиуретаны и т. п.).

Представленная структура позволяет лучше понять действие катализаторов в волне горения. Остается невыясненной физика процесса перехода к-фазы в газ. Есть предположение, что это пленочное кипение, сопровождаемое экзотермической реакцией. По-видимому, скорость реакции в р.с. к-фазы очень высокая из-за высокой плотности. При переходе в газ плотность резко уменьшается, уменьшается и скорость реакции (по скорости тепловыделения). Такое явление названо каскадным механизмом.

**Задача 2.** Исследование физики процесса обдува горящих КЭМ (эрозийного горения) было изучено экспериментально на примере баллистических порохов уже давно. В последующие годы была создана методика расчета (модель), в основе которой — полученные без обдува в задаче 1 функции скорости тепловыделения в газовой фазе СТВ. Расчет использует теорию турбулентного пограничного слоя. Турбулентность трансформирует функции СТВ, что увеличивает скорость горения. Получено хорошее совпадение по скоростям горения с экспериментом. В настоящее время предпринимаются попытки найти обобщения в СТВ порохов разных классов. Это необходимо для более широких исследований эрозии, так как получение функций СТВ для каждого нового КЭМ и режима горения весьма трудоемки.

**Задача 3.** По формулам, предложенным Б.В. Новожиловым, рассчитаны функции отклика скорости горения (ФОС) ряда КЭМ (баллистические пороха, циклические нитрамины), показывающие пульсации амплитуды скорости горения и их фазы при различных частотах и амплитудах. Расчеты сделаны в линейном и квадратичном приближениях, а также с учетом плавления к-фазы на поверхности горения. В основе расчетов — чувствительности скорости горения и температуры поверхности, полученные при решении задачи 1. В американской научной литературе указывается, что ФОС — это исходная информация для анализа реальных процессов в ракетных камерах на твердом топливе. В настоящее время анализируются особенности пульсационной скорости горения топлив различных типов.



**Задача 4.** Несколько десятилетий назад Б. В. Новожилов предложил критерий устойчивости стационарного горения КЭМ, который учитывает реальные характеристики зон горения, полученные при решении задачи 1. Этот критерий точнее критерия Я. Б. Зельдовича предсказывает устойчивость горения. В настоящее время все изученные КЭМ проверены на устойчивость по Новожилову. Как правило, их горение устойчиво. Исключение составляют некоторые смесевые пороха с пассивной связкой (их применение не рекомендовано). При изучении задач 2 и 3 был найден критерий устойчивости горения КЭМ при пульсирующем обдуве. Оказалось, что такое горение гораздо чаще неустойчиво. Данные пока не опубликованы, исследование продолжается.

Тезисы могут быть проиллюстрированы формулами и графиками.

**В. Ю. Клименко**

### **Использование гидрокодов для моделирования детонационных процессов**

Гидрокоды (газодинамические вычислительные пакеты) становятся стандартным инструментом исследователей и разработчиков боеприпасов для изучения взрывных процессов. И это очень хорошо. Однако надо понимать, какие здесь существуют скрытые проблемы. Самая главная — это проблема качества моделей, заложенных в гидрокод.

Модели металлов и других инертных материалов изучены достаточно хорошо. Например, для металлов наиболее современные модели (Johnson–Cook, Zerilli–Armstrong и Steinberg–Guan) включены практически во все современные гидрокоды. С моделями детонации дело обстоит сложнее.

На сегодняшний день существуют несколько механизмов детонации. Им соответствуют разные численные модели: (1) очаговая, (2) фронтальная и (3) дислокационная. Очаговая модель описывает схлопывание пор в ВВ, их зажигание и дальнейшее послойное горение. Модель применима при давлениях выше 20 кбар. Ниже 20 кбар поры схлопываются, но не зажигаются. В таких условиях может работать дислокационный механизм. При пластической детонации кристаллов ВВ движущиеся дислокации вызывают распад ВВ и образование первичных радикалов, которые запускают последующую цепочку реакций до полного распада ВВ и образования продуктов взрыва. Механизм экзотический, но он, по-видимому, определяющий в большинстве случаев инициирования зарядов ВВ пулями и осколками. Другими словами, этот механизм проявляется довольно часто.

Возвращаясь к очаговому механизму, следует отметить, что он доминирует только до определенных давлений. При давлениях выше примерно 150 кбар на первый план выходит фронтальный механизм. Суть фронтального механизма в том, что во фронте ударной волны возникают сильно нерав-

новесные состояния, вызывающие ускоренный распад молекул ВВ. Образовавшиеся радикалы запускают дальнейшую цепочку реакций распада ВВ. Этот механизм дает очень высокую скорость распада.

В последнее время появился новый класс ВВ — низкочувствительные ВВ, в которых пор совсем нет. В таких ВВ очаговый механизм не работает. Совсем недавно для описания инициирования таких ВВ был разработан новый механизм — так называемый механизм активированной поверхности. Суть его в том, что при проходе ударной волны по материалу «зерна ВВ + связка» поверхность зерен подвергается интенсивной деформации и, согласно дислокационному механизму, в поверхностном слое образуются радикалы. Кроме того, поверхность имеет повышенную температуру. В итоге поверхности зерен быстро зажигаются и возникает послойное горение.

Я перечислил четыре ключевых механизма, которые могут управлять детонационным процессом. Для точного моделирования этих процессов с помощью гидрокодов необходимо, чтобы гидрокоды включали все эти механизмы.

Массовое распространение в России получили американские гидрокоды LS-DYNA и AUTODYN. Из четырех перечисленных механизмов эти гидрокоды содержат лишь один — очаговый. Понятно, что в таком случае точность расчета невелика, а такие гидрокоды можно использовать разве что для начального обучения студентов.

Считаю, что для точных расчетов необходимо использовать гидрокоды, в которые заложены все перечисленные выше механизмы (например, отечественный гидрокод ЭГИДА (ВНИИЭФ)).

## **К. Я. Трошин**

### **Экспериментальное исследование модельных топлив в различных режимах горения**

В науке о горении, имеющей чрезвычайно широкое практическое применение, приходится решать целый ряд разнообразных задач, связанных с пожаровзрывобезопасностью, развитием энергетики, экологией, созданием новых материалов.

Почти все транспортные средства — воздушные, наземные или водные — в настоящее время используют энергию, получаемую от сжигания топлива в двигательных установках. Лишь небольшая доля транспорта использует электроэнергию. Двигатели, использующие ядерную энергию, применяются лишь на флоте. Однако 90% энергии, вырабатываемой во всем мире, получают при сжигании угля, нефти и газа.

Сложность задач, как правило, определяется разнообразием условий, в которых протекает исследуемый процесс, так что не всегда представляется

возможным проведение экспериментальных исследований. В этом случае приходится прибегать к компьютерному или экспериментальному моделированию, а иногда и к комплексному использованию компьютерного и экспериментального моделирования, дающего в ряде случаев положительные результаты.

Волны горения в одной и той же реагирующей среде в зависимости от начальных условий могут реализовываться в различных режимах: от ламинарного пламени до детонации. К начальным условиям, которые влияют на скорость горения или, что то же самое, на режим распространения пламени, можно отнести источник зажигания, состав и свойства компонентов смеси, давление, температуру, наличие и свойства стенок реактора или камеры сгорания и т. д. В разных режимах в разной степени могут проявляться диффузия, теплопередача или газодинамические явления. При переходе от одного режима горения к другому какие-то процессы, игравшие ведущую роль, теряют свое значение и включаются другие явления, обеспечивающие распространение волны. Например, в механизме распространения детонационных волн диффузия и теплопроводность несут незначительную роль, поскольку характерные времена самовоспламенения и сгорания за ведущей ударной волной настолько коротки, что они не успевают в значительной степени повлиять на распространение детонации. Однако эти явления проявляются при распространении ламинарных и турбулентных пламен.

Все разнообразие механизмов распространения волн горения, независимо от условий, объединяет явление, имеющее зачастую различную природу, — это воспламенение.

Возникновение горения всегда есть результат самоускорения химической реакции, которое становится возможным только при наличии определенных условий, создаваемых внешним источником, например нагретой поверхностью реактора, сжатием смеси, поглощением излучения и т. д. Все эти столь различные виды воспламенения имеют общие закономерности теплового и цепного самоускорения реакции, определяющие природу теплового и цепного взрывов, достаточно широко и полно изученных в работах Н. Н. Семенова, О. М. Годеса, Я. Б. Зельдовича, Д. А. Франк-Каменецкого. Когда главным предметом рассмотрения является сам процесс самоускорения реакции независимо от свойств начального источника тепла, процесс возникновения пламени принято называть самовоспламенением, хотя никакого принципиального различия в содержании терминов «воспламенение» и «самовоспламенение» нет.

В определенных условиях тепловыделение может превышать теплопотери (осуществляется режим саморазогрева системы), что приводит к еще более интенсивному тепловыделению вследствие увеличения скорости химической реакции, скорость которой экспоненциально зависит от температуры. Такова, в основном, природа теплового самовоспламенения.

Причина чисто цепного взрыва заключается в непрерывном, лавинообразном увеличении числа активных центров, ведущих химическое превращение.

На практике чрезвычайно трудно установить различие между так называемыми цепным и тепловым взрывами. О цепном взрыве можно с уверенностью говорить лишь в том случае, когда повышение температуры в течение периода индукции воспламенения не наблюдается. Доказательство того, что взрыв является чисто тепловым, видят обычно в совпадении экспериментально измеренных суммарных кинетических параметров с рассчитанными по тепловой теории.

Одно из важных теоретических направлений — совместное рассмотрение цепных и тепловых процессов. Это сложная задача из-за разнообразия кинетических закономерностей, а также из-за наличия в общем случае двух видов самоускорения: цепного и теплового. Исследования в этом направлении у нас активно проводил и проводит проф. А. А. Борисов.

Основной экспериментально измеряемой характеристикой процесса в этом случае является задержка воспламенения (период индукции), которая представляет собой время, протекающее между моментом установления в смеси заданных значений температуры и давления и началом интенсивного (резкого) самоускорения реакции.

Хотя горение — быстрый процесс, тем не менее, в ряде случаев его скорость является недостаточной, и именно она ограничивает технические возможности разного рода устройств, в которых в качестве источника энергии используется сжигание топлива. Это, прежде всего, ограничения по давлению, скорости потока и составу смеси при стабилизации пламени в воздушно-реактивных двигателях, ограничения по оборотности в поршневых двигателях и ограничения по скорости и теплонапряженности в энергетических установках большой производительности.

Чрезвычайно важное значение для моделирования процессов перехода горения в детонацию, особенно в условиях импульсно-детонационных двигателей, имеет информация о поведении задержек воспламенения топлива в широком диапазоне температур и давлений. В идеальном случае желательно иметь простой (включающий лишь несколько стадий) кинетический механизм, адекватно описывающий такие сложные топлива, как керосин или бензин. Однако эти топлива представляют собой смесь большого количества алканов, а также циклических и ароматических соединений. Детальный кинетический механизм окисления каждого из компонентов этих топлив включает десятки и сотни частиц и состоит из сотен элементарных стадий. С одной стороны, очевидно, что разработать упрощенный механизм энергетического выделения из совокупности всех детальных механизмов весьма сложно. С другой стороны, для получения упрощенного механизма, адекватно описывающего скорость энергетического выделения в реальных топливах, достаточно использовать два–три основных компонента, входящих в состав

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  $80 \times 80$  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  $\sim 100$  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.

14. Abel, F. A. 1869. Nouvelles études sur les propriétés des corps explosibles. Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Paris. 69:105–21.
15. Abel, F. A. 1870. Nouvelles études sur les propriétés des corps explosibles. Annales de chimie et de physique, Paris. 4-e sér. 11:170.
16. Abel, F. A. 1873. The rapidity of detonation. *Nature* 8:534.
17. Abel, F. A. 1874. Contributions to the history of explosive agents. Second memoir. *Phil. Trans. R. Soc. L.* 164:337–95.
18. Abel, F. A. 1874. Études sur les propriétés des corps explosibles. Deuxième mémoire. Annales de chimie et de physique, Paris. 5-e sér. 2:170–92.
19. Чельцов И. М. Взрывчатые вещества // Энциклопедический словарь Брокгауза и Ефрона. — СПб., 1892. Т. 6(11). С. 176–206.
20. Manson, N. 1987. Historique de la découverte de l'onde de detonation. *J. de Physique*. Colloque C4, supplément au No. 9. 48:7–37.