

# ТРЕХМЕРНОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ В КАПЕЛЬНОЙ ГАЗОВЗВЕСИ НОРМАЛЬНОГО ГЕКСАДЕКАНА В ВОЗДУХЕ\*

В. С. Иванов<sup>1</sup>, С. М. Фролов<sup>2</sup>

**Аннотация:** Методом численного моделирования изучаются отличия и особенности распространения в вертикальном канале волн гетерогенной детонации в капельно-воздушных газовзвесах *n*-гексадекана и *изо*-октана — горючих жидкостей с сильно различающейся летучестью паров при нормальных условиях. Различие в летучести паров приводит к тому, что условия существования гетерогенной детонации в капельно-воздушных газовзвесах *n*-гексадекана и *изо*-октана сильно различаются. Если в капельно-воздушных газовзвесах *изо*-октана гетерогенную детонацию в канале можно инициировать без принятия каких-либо специальных мер, то инициировать гетерогенную детонацию, например в стехиометрической капельно-воздушной газовзвеси *n*-гексадекана, можно только при степени предиспарения жидкости выше некоторого критического значения (около 40%). При степени предиспарения жидкости ниже этого критического значения химическое энерговыделение за лидирующей ударной волной не обеспечивает самоподдерживающийся характер распространения волны реакции. При переходе через критическое значение степени предиспарения жидкости происходит смена режима энерговыделения в волне реакции: в ней появляется период быстрого (кинетически лимитированного) самовоспламенения паровоздушной смеси за лидирующей ударной волной со значительным повышением температуры, которое ускоряет последующие процессы смесеобразования и (диффузионно-лимитированного) энерговыделения. При докритическом значении степени предиспарения этот период выражен слабо.

**Ключевые слова:** гетерогенная детонация; трехмерное математическое моделирование; численное моделирование; капли жидкого горючего; *n*-гексадекан

DOI: 10.30826/CE24170306

EDN: ZPVKIA

## Литература

1. Бейкер У., Кокс П., Уэстайн П. и др. Взрывные явления. Оценка и последствия / Пер. с англ. — М.: Мир, 1986. Т. 1. 319 с. (Baker W. E., Cox P. A., Westine P. S., et al. Explosion hazards and evaluation. — 1st ed. — Amsterdam — Oxford — New York: Elsevier Scientific Publishing Co., 1983. 807 p.)
2. Marshall V. C. Major chemical hazards. — New York, NY, USA: Ellis Horwood, 1987. 587 p.
3. Зельдович Я. Б., Компанец А. С. Теория детонации. — М.: Гос. изд-во технико-теоретической литературы, 1955. 268 с.
4. Нетлетон М. Детонация в газах / Пер. с англ. — М.: Мир, 1989. 280 с. (Nettleton M. A. Gaseous detonations: Their nature, effects and control. — London — New York: Chapman and Hall, 1987. 255 p.)
5. Zel'dovich Ya. B. Regime classification of an exothermic reaction with nonuniform initial conditions // Combust. Flame, 1980. Vol. 39. No. 2. P. 211–214.
6. Frolov S. M., Basevich V. Ya., Posvianskii V. S. Limiting drop size and pre vaporization degree required for spray detonation // Application of detonation to propulsion / Eds. G. D. Roy, S. M. Frolov, J. E. Shepherd. — Moscow: TORUS PRESS, 2004. P. 110–119.
7. Басевич В. Я., Фролов С. М., Посвянский В. С. Условия существования стационарной гетерогенной детонации // Хим. физика, 2005. Т. 24. № 7. С. 58–68.
8. Papavassiliou J., Makris A., Knystautas R., Lee J. H. S., Westbrook C. K., Pitz W. J. Measurements of cellular structure in spray detonations // Dynamic aspects of explosion phenomena / Eds. A. L. Kuhl, J.-C. Leyer, A. A. Borisov, and W. A. Sirignano. — Progress in astronautics and aeronautics ser. — Washington, DC, USA: AIAA, 1993. Vol. 154. P. 148–169.
9. Митрофанов В. В. Детонация гомогенных и гетерогенных систем. — Новосибирск: Изд-во Ин-та гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 2003. 200 с.
10. Borisov A. A., Gel'fand B. E., Gubin S. A., Kogarko S. M., Podgrebenkov A. L. The reaction zone of two-phase detonations // Astronaut. Acta, 1970. Vol. 15. No. 5-6. P. 411–417.

\*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-23-00364).

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук, ivanov.vls@gmail.com

<sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, smfrol@chph.ras.ru

11. Eidelman S., Burkat A. Evolution of a detonation wave in a cloud of fuel droplets. Part I: Influence of ignition explosion // AIAA J., 1970. Vol. 18. No. 9. P. 1103–1109.
12. Ждан С. А. Расчет сферической гетерогенной детонации // Физика горения и взрыва, 1976. Т. 12. № 4. С. 586–594. EDN: YMESYN.
13. Ждан С. А. Расчет гетерогенной детонации с учетом деформации и распада капель горючего // Физика горения и взрыва, 1977. Т. 13. № 2. С. 258–263. EDN: YMUSRN.
14. Gubin S. A., Sichel M. Calculation of the detonation velocity of liquid droplets and gaseous oxidizer // Combust. Sci. Technol., 1977. Vol. 17. No. 3-4. P. 109–117.
15. Borisov A. A., Gelfand B. E., Gubanov A. V. The effect of relaxation processes on the detonation in heterogeneous mixtures // Archivum Combustionis, 1981. Vol. 1. No. 3/4. P. 243–249.
16. Ждан С. А., Воронин Д. В. Расчет инициирования гетерогенной детонации в трубе взрывом водородокислородной смеси // Физика горения и взрыва, 1984. Т. 20. № 4. С. 112–117. EDN: ZIUQYV.
17. Sichel M. Numerical modeling of heterogeneous detonations // Numerical approaches to combustion modeling / Eds. E. S. Oran, J. P. Boris. — Progress in astronautics aeronautics ser. — New York, NY, USA: AIAA Inc., 1991. Vol. 135. P. 447–458.
18. Срезневский Б. И. Об испарении жидкостей // Ж. Русского физико-химического общества, 1882. Т. 14. № 8. С. 420–442.
19. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. — М.: Наука, 1987. Ч. 1. 464 р.
20. Фролов С. М., Басевич В. Я., Посвянский В. С., Сметанюк В. А. Испарение и горение капли углеводородного топлива. IV. Испарение капли с учетом коллективных эффектов // Хим. физика, 2004. Т. 23. № 7. С. 41–50. EDN: OXOERR.
21. Фролов С. М., Сметанюк В. А. Тепло- и массообмен капли с газовым потоком // Хим. физика, 2006. Т. 25. № 4. С. 42–54. EDN: НТИНТJ.
22. Ranz W. E., Marshall W. R., Jr. Evaporation from drops, part I // Chem. Eng. Prog., 1952. Vol. 48. P. 141–146.
23. Борисов А. А., Фролов С. М., Сметанюк В. А., Полихов С. А., Сегал К. Взаимодействие капли горючего с газовым потоком // Хим. физика, 2005. Т. 24. № 7. С. 50–57.
24. Ju Y., Law C. K. Propagation and quenching of detonation waves in particle laden mixtures // Combust. Flame, 2002. Vol. 129. No. 4. P. 356–364.
25. Lu T. F., Law C. K. Heterogeneous effects in the propagation and quenching of spray detonations // J. Propul. Power, 2004. Vol. 20. No. 5. P. 820–827.
26. Фролов С. М., Посвянский В. С. Структура и пределы гетерогенной детонации // Горение и взрыв, 2008. Вып. 1. С. 1–5.
27. Frolov S. M., Posvyanskii V. S. Detonability of liquid-fuel drop suspensions in air // Explosion dynamics and hazards / Eds. S. M. Frolov, F. Zhang, P. Wolanski. — Moscow: TORUS PRESS, 2010. P. 337–364.
28. Фролов С. М., Басевич В. Я. Горение капель // Законы горения / Под ред. Ю. В. Полежаева. — М.: УНПЦ «Энергомаш», 2006. С. 130–159.
29. Иванов В. С., Фролов С. М., Зангиев А. Э. Структура детонационной волны в двухфазной системе газобразный окислитель – капли жидкого горючего // Горение и взрыв, 2024. Т. 17. № 3. С. 49–61.
30. Ivanov V. S., Frolov S. M. Three-dimensional mathematical simulation of two-phase detonation in the system of a gaseous oxidizer with fuel droplets // Russ. J. Phys. Chem. B, 2024. Vol. 18. No. 5. P. 1341–1349. doi: 10.1134/S1990793124701112.
31. Benmahammed M. A., Veysiére B., Khasainov B. A., Mara M. Effect of gaseous oxidizer composition on the detonability of isooctane-air sprays // Combust. Flame, 2016. Vol. 165. P. 198–207.
32. Reitz R. D. Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays // Atomization Spray Technology, 1987. Vol. 3. No. 4. P. 309–337.
33. Dukowicz J. K. Quasi-steady droplet change in the presence of convection. — Los Alamos, CA, USA: University of California, 1979. 18 p.
34. Pope S. B. PDF methods for turbulent reactive flows // Prog. Energ. Combust., 1985. Vol. 11. No. 2. P. 119–192.
35. Frolov S. M., Ivanov V. S. Combined flame tracking particle method for numerical simulation of deflagration-to-detonation transition // Deflagrative and detonative combustion / Eds. G. Roy, S. Frolov. — Moscow: TORUS PRESS, 2010. P. 133–156.
36. Frolov S. M., Ivanov V. S., Basara B., Suffa M. Numerical simulation of flame propagation and localized preflame autoignition in enclosures // J. Loss Prevent. Proc., 2013. Vol. 26. P. 302–309.
37. Басевич В. Я., Беляев А. А., Медведев С. Н., Посвянский В. С., Фролов С. М. Кинетические детальный и глобальный механизмы для суррогатного топлива // Горение и взрыв, 2015. Т. 8. № 1. С. 21–28.

Поступила в редакцию 03.07.2024