ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ

УДК 533.6.07

РАСПРОСТРАНЕНИЕ И ПОДАВЛЕНИЕ ДЕТОНАЦИИ В ПОЛУОГРАНИЧЕННОМ СЛОЕ СМЕСИ ВОДОРОД–ВОЗДУХ

© 2022 г. С. П. Медведев^{1*}, О. Г. Максимова¹, Т. Т. Черепанова¹, Г. Л. Агафонов¹, Э. К. Андержанов¹, А. М. Тереза¹, С. В. Хомик¹

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, Москва, Россия

**E-mail: podwal_ac@yahoo.com* Поступила в редакцию 17.05.2022; после доработки 15.06.2022; принята в печать 20.06.2022

Выполнен анализ результатов численного моделирования распространения детонационной волны в слое горючей газовой смеси, ограниченном с одной стороны стенкой, а с другой — объемом, заполненным инертным газом. Расчеты проведены с помощью пакета газодинамического моделирования Gas Dynamics Tool в двумерной постановке для модельного газа с параметрами, соответствующими смеси водород—воздух стехиометрического состава. Выявлены особенности эволюции ячеистой структуры детонационной волны в процессе распространения по полуограниченному слою. Показано, что с увеличением толщины слоя экспоненциально растет расстояние, на котором детонация затухает. Рассмотрена задача ослабления действия взрыва за счет создания промежуточного инертного газового слоя, отделяющего горючую смесь от защищаемой поверхности. Установлено, что детонационная волна эффективно разрушается при толщине инертного слоя, соответствующего размеру детонационной ячейки.

Ключевые слова: детонация, численное моделирование, детонационная ячейка, взрыв, водородновоздушная смесь.

DOI: 10.31857/S0207401X22110085

введение

Авария на атомной электростанции (АЭС) Three Mile Island (TMI), произошедшая в США в 1979 году, дала импульс для развертывания по всему миру масштабных программ экспериментального и теоретического исследования горения и взрыва водородно-воздушных смесей. Был достигнут значительный прогресс в понимании закономерностей аварийных ситуации с участием водорода и получены новые данные по самовоспламенению, горению и детонации [1]. Однако развитие катастрофических событий на АЭС Фукусима (Япония, 2011 г.) показало, что проблема обеспечения водородной взрывобезопасности на атомной электростанции является по-прежнему весьма актуальной. При этом если в случае TMI речь шла о медленном горении бедной смеси (около 8% водорода в воздухе) [2], то масштаб разрушений на Фукусиме свидетельствовал о значительно бо́льших нагрузках, которые могли возникнуть при быстром горении или детонации водородно-воздушных смесей околостехиометрического состава [1, 3]. Для достижения полноты понимания сложных физико-

большими количествами водорода проведение крупномасштабных экспериментов требует больших затрат, а иногда и невозможно. Поэтому во многих случаях, учитывая возрастающую мощность компьютерной техники, именно численное моделирование позволяет изучить возможные сценарии развития горения и взрыва водорода. Авария на Фукусиме была обусловлена сбоем электроснабжения и последующим нарушением теплоотвода, что привело к разогреву и разрушению реактора. В результате цепочки физико-химических процессов, в том числе радиолиза воды,

химических процессов, сопровождающих воспламенение и горение водорода, целесообразно

совместное использование результатов теории,

численного моделирования и эксперимента.

Важно отметить, что при исследовании и про-

гнозировании аварий на АЭС и производствах с

произошло интенсивное выделение большого количества водорода. При этом в пространстве под куполом защитной оболочки АЭС скопился водород, который при смешении с воздухом сформировал полуограниченный горючий газовой слой [3]. Воспламенение и горение этой смеси привело к разрушению защитной оболочки реакторного зала и выбросу радиоактивных продуктов в атмосферу. При таком сценарии важно не только определить ударно-волновые нагрузки на ограничивающую стенку (защитную оболочку реакторного зала АЭС), как это сделано в работах [3, 4], но и выявить пути уменьшения динамической нагрузки при взрыве водородсодержащей смеси.

Цели работы — анализ результатов численного моделирования развития детонационной волны (ДВ) в полуограниченном слое водородно-воздушной смеси стехиометрического состава и определение критических геометрических параметров, влияющих на распространение и затухание детонации. Рассмотрена задача ослабления действия взрыва за счет создания промежуточного инертного газового слоя, отделяющего горючую смесь от защищаемой поверхности.

ОБЪЕКТ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

При аварийном выбросе водород скапливается под потолком помещения, образуя взрывоопасную смесь с воздухом. При наличии источника воспламенения, например слабого электрического разряда или гетерогенной реакции [5], возможно инициирование различных режимов горения полуограниченного водородно-воздушного слоя, включая возникновение детонационной волны [6]. В двумерной постановке задачи о распространении ДВ вдоль слоя основным геометрическим параметром является его толщина, которая может влиять на распространение и затухание детонации. В работах [7, 8] путем численного моделирования найдена критическая толщина газового слоя для различных смесей, при которой еще возможно стационарное распространение детонации. Расчеты в [7, 8] проведены для гладкого детонационного фронта без учета ячеистой структуры. Однако, как доказано многочисленными экспериментами [1], именно размер детонационной ячейки играет решающую роль в критических явлениях инициирования и распада ДВ. В данной работе численное моделирование детонации в полуограниченном горючем газовом слое проведено с помощью пакета газодинамического моделирования Gas Dynamics Tool (GDT) [9], в котором по алгоритму, изложенному в работе [10], реализуется инициирование ДВ с развитой ячеистой структурой.

Расчеты проведены для модельного газа с параметрами, соответствующими стехиометрической смеси водород—воздух при нормальных условиях. Предполагалось, что газ вязкий и теплопроводный с отношением удельных теплоемкостей $\gamma = 1.35$. Скорость химической реакции (одностадийный механизм) описывали зависи-

мостью от температуры аррениусовского вида:

 $k = A[F]^{n}[O]^{m} \exp(-T_{a}/T)$, где [F] и [O] – относительные массовые концентрации топлива и окислителя (кислорода). Параметры, описывающие скорость реакции, выбирались с учетом данных по задержке самовоспламенения исследуемой смеси, рассчитанной по детальному реакционному механизму. Для объекта исследования – смеси 30% H₂ + 70% воздуха при нормальных условиях $T_{a} = 15000$ K, $A = 8 10^{14}$ c⁻¹, n = 1, m = 8. Моделирование проводилось в двухмерной постановке на прямоугольной и неадаптивной сетке с размером расчетной ячейки в 0.2 мм. Число ячеек достигало 28000000 при шаге по времени 20 нс.

Расчетная область представляет собой прямоугольник, ограниченный сверху и слева жесткой стенкой. Справа и снизу задано неотражающее граничное условие. Физический размер расчетной области варьировался в зависимости от толщины слоя горючего газа, *h*_c, который помещался в верхней половине прямоугольника. Величина h_c варьировалась в диапазоне от 50 до 150 мм с шагом 25 мм. В левой части расчетной области расположен участок разгона ДВ длиной 0.6 м, на котором горючий слой ограничен снизу жесткой стенкой. Для инициирования детонации на начальном участке разгона задавалась область длиной 10 мм с давлением 100 атм и температурой 6000 К. На участке разгона вследствие развития неустойчивости формировалась ДВ с развитой ячеистой структурой, которая в дальнейшем распространялась по слою горючей смеси, ограниченному сверху жесткой стенкой, а снизу – воздухом.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Визуализация результатов численного моделирования в двумерной постановке дает возможность выявить неодномерную структуру фронта детонационной волны и его трансформацию в процессе ее распространения в заданных условиях. В верхней части рис. 1 приведена картина эволюции ДВ при толщине горючего слоя $h_c = 125$ мм. На выходе из участка разгона (кадр 1) формируется ДВ с развитой ячеистой структурой. Поперечный размер ячеек на участке разгона составляет 8-10 мм, что соответствует экспериментальным значениям для стехиометрической смеси водород-воздух при нормальных условиях. Отметим, что преувеличивать значение этого совпаления не следует. поскольку ячеистая структура детонации имеет существенно трехмерную природу. Тем не менее, так же как и в трехмерном случае, двумерные ячейки генерируются в результате столкновений поперечных ударных волн. Поэтому, несмотря на ограничения, присущие двумерной постановке задачи, и в этом случае критические условия ини-



Рис. 1. Эволюция фронта ДВ и траектории тройных точек в слое толщиной 125 мм. Скорость фронта волны приведена для различных величин h_c : 1 - 75 мм, 2 - 100 мм, 3 - 125 мм.

циирования или затухания ДВ так или иначе связаны с возникновением или распадом ячеистой структуры.

Для достижения наибольшей информативности обработку результатов расчетов проводили с интервалом времени в 1 мкс. В результате получали траектории локальных областей максимального давления (аналогов тройных точек), моделирующих ячеистую структуру детонации, которая для рассматриваемого случая приведена на рис. 1. Сопоставление расчетных кадров 1-5 с картиной "следовых отпечатков" дает информацию о различных стадиях процесса распространения ДВ по полуограниченному горючему слою. Видно, что после выхода из разгонного участка на течение в ДВ действует боковая волна разрежения. В результате ячеистая структура нарушается. Траектории тройных точек не пересекаются и ячейки трансформируются в полосы, ширина которых растет по мере распространения волны.

Для удобства анализа в нижней части рис. 1 для различных величин h_c приведены зависимости скорости распространения фронта V вдоль стенки от расстояния L, отсчитываемого от выхода из разгонного участка. Как видно из рис. 1 (кривая 3), несмотря на отличия "полосатой" структуры от классической ячеистой, усредненная величина V близка к скорости детонации Чепмена–Жуге $D_{CJ} = 1920$ м/с вплоть до значения L = 0.9 м. Это обусловлено инициированием горячих точек при отражении серии волн от стенки. В окрестности стенки формируется локальная ячеистая структура, которая, в свою очередь, подвергается возлействию волны разрежения, распространяющейся от границы горючий газ - воздух. Конкуренция этих процессов приводит к исчезновению ячеистой структуры при $L \approx 0.9$ м. После этого фронт волны начинает замедлятся, однако на расстоянии около L = 1.1 м возникает очаг высокого давления уже не на стенке, а в средней части горючего слоя (кадр 4), который инициирует сильную поперечную волну, и скорость фронта последней, измеряемая в окрестности стенки, вырастает до величины, превышающей D_{CI} . Этой одиночной поперечной волны оказывается недостаточно для поддержания детонации и, начиная с L = 1.3 м, наблюдается затухающая ударная волна с гладким фронтом (кадр 5). За расстояние, на котором происходит затухание, L_a, примем местоположение фронта волны на стенке, при котором его скорость падает до величины менее 1000 м/с и в дальнейшем только уменьшается без эффекта реинициирования детонации.

Влияние толщины горючего слоя на динамику затухания детонации иллюстрируют кривые 1, 2 зависимости V(L), приведенной на рис. 1. Каждое уменьшение величины h_c на 25 мм приводит к почти двукратному сокращению расстояния затухания. При этом для случаев $h_c = 100$ и 75 мм также наблюдаются процессы реинициирования за счет генерации поперечной волны давления при отражении от стенки. Эффект реинициирования от-сутствует при толщине горючего слоя 50 мм и меньше. В этом случае затухание детонации про-исходит под воздействием боковой волны разре-



Рис. 2. Эволюция ячеистой структуры в слое толщиной $h_c = 125$ мм при различной толщине инертного слоя h_i : a - 5 мм, $\delta - 10$ мм, e - 15 мм, c - 20 мм.



Рис. 3. Профили давления на расстоянии L = 0.6 м при различной толщине инертного слоя: a – на ограничивающей стенке, δ – на границе горючий газ – воздух; $h_i = 0$ (I), 5 (2), 10 мм (3).

жения. Отметим также, что при $h_c = 150$ мм расстояние L_a увеличивается до 2.5 м.

Одним из путей уменьшения динамической нагрузки является размещение демпфирующей прослойки между нагружаемым объектом и массивом детонирующего газа. Таким защитным экраном может служить слой инертного газа в области между жесткой стенкой и горючим газовым слоем. Влияние толщины инертного слоя h_i на развитие детонации в горючем газе при $h_c = 125$ мм представлено на рис. 2. Расчетная область дополнялась на всем протяжении секции разгона ДВ прямоугольным твердым телом толщиной h_i , примыкающим к верхней границе, как это показано на рис. 2 на участке левее L = 0. За участком разгона (при L > 0) по всей длине расчетной области располагался слой инертного газа (воздуха) соответствующей толщины, отделяющий горючую смесь от верхней стенки. Как видно из рис. 2*a*, при относительно малой величине $h_i = 5$ мм детонационная волна затухает на таком же расстоянии, что и в отсутствие инертного слоя. Увеличение толщины слоя до $h_i = 10$ мм (рис. 2*б*) приводит к резкому уменьшению расстояния гашения ДВ до $L_q = 0.4$ м. Дальнейшее увеличение толщины инертного слоя (рис. 2*b*, *c*) не приводит к значительным изменениям величины L_q .

При интерпретации полученных эффектов необходимо учитывать, что на начальной стадии в демпфирующем газовом слое формируется ударная волна, падающая на ограничивающую по-



Рис. 4. Зависимость расстояния L_q от толщины горючего слоя при $h_i = 0$ (1) и 10 мм (2).

верхность под определенным углом. Отражение этой и серии последующих волн приводит к локальному росту давления, что является фактором, способствующим поддержанию детонации в горючем слое при малой величине $h_i = 5$ мм. С увеличением толщины инертного слоя до 10 мм проникающая в него ударная волна затухает и не поддерживает детонацию на расстоянии более 0.4 м от начала инертной области. Таким образом, проведенный анализ показывает, что инертные слои толщиной 10 мм и более эффективно подавляют детонацию.

Профили давления, представленные на рис. 3, иллюстрируют эффективность инертного газового слоя для снижения динамической нагрузки на ограничивающую стенку. Как видно, при $h_i = 5$ мм, как и в отсутствие инертного слоя, наблюдается профиль давления, типичный для детонационной волны в стехиометрической смеси водород—воздух с давлением в плоскости Чепмена—Жуге около 16 атм. При наличии слоя с $h_i = 10$ мм ДВ вырождается в волновой комплекс ударная волна — фронт реакции с избыточным давлением 10—11 атм, которое быстро уменьшается по мере дальнейшего распространения. Гашение ДВ наблюдается как на стенке (рис. 3*a*), так и на границе горючая смесь — воздух (рис. 3*б*).

На рис. 4 приведены рассчитанные зависимости расстояния L_q , на котором происходит затухание детонации, от толщины горючего газового слоя, h_c . Результаты расчетов в отсутствие инертного слоя (кривая I) описываются экспоненциальной функцией следующего вида:

$L_a = 0.032 \exp(29.3h_c).$

При наличии инертного слоя с $h_i = 10$ мм наблюдается сокращение величины L_q в 3–5 раз. При этом кривая 2, характеризующая результаты расчетов, имеет перегиб в интервале между значениями $L_q = 0.125$ и 0.15 м, после чего возрастание величины L_q значительно замедляется. Отсюда следует, что для эффективного сокращения расстояния затухания детонации в произвольном горючем слое необходимо, чтобы толщина инертной области была не меньше размера детонационной ячейки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ результатов численного моделирования распространения детонационной волны в полуограниченном слое смеси водород-воздух проведен с использованием методики построения траекторий точек пересечения ударных волн, отражающих ячеистую структуру детонации. Полученный поперечный размер детонационных ячеек при стационарном распространении ДВ соответствует экспериментальным значениям для стехиометрической смеси водород-воздух. Несмотря на ограничения, накладываемые двумерной постановкой численного моделирования, используемый подход выявляет закономерности распространения, реинициирования и затухания ДВ. Показано, что после выхода стационарной детонационной волны в полуограниченный горючий газовый слой ячеистая структура разрушается из-за воздействия боковой волны разрежения, распространяющейся со стороны инертного газа. Однако при толщине горючего слоя более 50 мм наблюдаются эффекты реинициирования детонации в пристеночной области, где возможно зарождение поперечных волн давления. Установлено, что с увеличением толщины слоя экспоненциально растет расстояние, на котором детонация затухает.

Рассмотрена практически важная задача ослабления действия взрыва за счет создания промежуточного инертного газового слоя, отделяющего горючую смесь от защищаемой поверхности. Показано, что детонационная волна эффективно разрушается при толщине инертного слоя, соответствующего размеру детонационной ячейки.

Научно-исследовательская работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение госзадания (регистрационный номер 122040500073-4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Gelfand B.E., Silnikov M.V., Medvedev S.P., Khomik S.V.* Thermo-Gas Dynamics of Hydrogen Combustion and Explosion. Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag, 2012.
- Abramson P., Anderson L., Baker J. et al. Analysis of Three Mile Island – Unit 2 Accident. Report NSAC-80-1. Electric Power Research Institute, CA: NSAC, 1980.
- Kuznetsov M., Yanez J., Grune J., Friedrich A., Jordan T. // Nucl. Eng. Des. 2015. V. 286. P. 36.
- 4. Гальбурт В.А., Иванов М.Ф., Минеев В.Н. и др. // Мат. моделирование. 2002. Т. 14. № 1. С. 73.

- 5. Козлов С.Н. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 8. С. 40.
- 6. *Киверин А.Д., Смыгалина А.Е., Яковенко И.С. //* Хим. физика. 2020. Т. 39. № 8. С. 9.
- 7. *Иванов М.Ф., Фортов В.Е., Борисов А.А.* // Физика горения и взрыва. 1981. Т. 17. № 3. С.108.
- Шебеко Ю.Н., Корольченко А.Я., Еременко О.Я. // Там же. 1987. Т. 23. № 6. С. 89.
- 9. Zibarov A.V. // ASME. PVP. 1999. V. 397. № 1. P. 117.
- 10. Хомик С.В., Медведев С.П., Борисов А.А. и др. // Хим. физика. 2016. Т. 35. № 4. С. 48.