

© С.М. ФРОЛОВ, Б.Е. ГЕЛЬФАНД

О ПРЕДЕЛЬНОМ ДИАМЕТРЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ
ГАЗОВОЙ ДЕТОНАЦИИ В ТРУБАХ

(Представлено академиком В.И. Гольданским 15 XII 1989)

Существование пределов детонации при распространении в трубах обусловлено взаимодействием потока за детонационной волной (ДВ) со стенками трубы [1]. С уменьшением диаметра трубы потери, вызванные торможением и охлаждением потока на стенках, возрастают и наступает ситуация, когда самоподдерживающаяся детонация невозможна.

В настоящее время критерием для нахождения пределов газовой детонации в круглых трубах является наблюдаемый экспериментально переход от многофронтной структуры ДВ к структуре с одной поперечной волной (одноголовый спин) [2, 3]. Поскольку одноголовый спин возникает при $\lambda \approx \pi d$ [3] (здесь λ — поперечный размер ячейки, d — диаметр трубы), то определение предельного диаметра сводится к измерению или расчету размера ячейки λ . В [2–4] измерены значения λ для ряда топливно-воздушных (ТВС) и топливно-кислородных (ТКС) смесей. Обзор моделей ячейки и результатов численного моделирования многофронтной структуры ДВ в широких трубах приведен в [3], из которого следует, что только в некоторых случаях теоретически удается добиться хорошего согласия с экспериментальными данными по размеру ячейки.

Таким образом, теоретическое исследование пределов детонации проводится в отрыве от физического механизма предела, т.е. без учета потерь. Представляется целесообразным рассмотреть задачу о предельном диаметре распространения ДВ с учетом потерь импульса и энергии из зоны реакции и сравнить результаты с используемым эмпирическим критерием. Впервые задача о пределах детонации сформулирована в [1] в одномерном приближении, причем результаты [1] качественно согласуются с экспериментальными наблюдениями. При одномерной постановке задачи ключевыми остаются вопросы моделирования химического превращения смеси и расчета коэффициента сопротивления.

Известны два подхода к моделированию реакций в ДВ. Один основан на использовании данных по задержкам воспламенения смеси, получаемым в ударных трубах, другой — на детальной схеме окисления горючего [3]. При расчете потерь импульса возникает необходимость учета неустановившегося характера течения за фронтом ДВ. Поставленную выше задачу о предельном диаметре распространения ДВ с учетом потерь будем решать на основе первого подхода к моделированию реакций.

1. Кинетические параметры ТВС и ТКС выберем на основе сравнения выражений для адиабатического периода индукции

$$\tau_i = \frac{c_v RT}{kQE} \beta_0^{-(n-1)} \exp \frac{E}{RT}$$

и эмпирической зависимости для задержки воспламенения

$$(1) \quad \tau = A [F]^a [Ox]^b [In]^c \exp \frac{E^*}{RT},$$

где c_v — теплоемкость, R — газовая постоянная, T — температура, k — предэкспонент в уравнении реакции аррениусовского типа, Q — тепловой эффект реакции, E —

Таблица 1

Предельный диаметр детонации некоторых стехиометрических топливно-воздушных и топливно-кислородных смесей в гладкой трубе

№	Смесь	$A, 10^{11}$ $c \cdot M^{-\sigma}$ *	a	b	c	$E,$ ккал/ моль	$\frac{D_1}{D_0}$	$\frac{l_1}{d_1}$	$\beta^* l,$ %	$d_1, \text{мм}$	$\lambda, \text{мм}$
1	$\text{C}_2\text{H}_2 + 2,5\text{O}_2$	1,549	-0,67	-0,33	0,00	17,3	0,86	0,9	5	0,14	0,3
2	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{воз-}$ дух	1,549	-0,67	-0,33	0,00	17,3	0,90	1,5	5	2,10	6,0
3	$\text{C}_2\text{H}_4 + 3\text{O}_2$	0,355	0,00	-1,00	0,00	27,5	0,92	0,8	4	0,19	0,56
4	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{воз-}$ дух	0,355	0,00	-1,00	0,00	27,5	0,94	1,2	2,5	8,5	28,3
5	$\text{H}_2 + 0,5\text{O}_2$	2,254	0,00	-1,00	0,00	15,2	0,91	1,0	3	1,5	1,57
6	$\text{H}_2 + \text{воздух}$	2,254	0,00	-1,00	0,00	15,2	0,92	0,9	5	4	15
7	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{воз-}$ дух	2,350	0,46	-1,26	0,00	34,2	0,96	0,9	0,8	52	60
8	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{воз-}$ дух	28,0	0,29	-1,19	0,39	36,8	0,98	0,7	0,7	80	63
9	$\text{CH}_4 + \text{воздух}$	12590	0,48	-1,94	0,00	46,2	0,98	1,0	0,7	500	330

* $M = \text{моль/л}, \sigma = a + b + c$

энергия активации, β — степень продвижения реакции, n — порядок реакции, $[F]$, $[Ox]$ и $[In]$ — мольные концентрации горючего, окислителя и инертного разбавителя в смеси, E^* — экспериментальное значение эффективной энергии активации. Из такого сравнения следует, что

$$n = 1 - (a + b + c),$$

$$E = E^*,$$

$$k = \frac{c_0 R T_f^2}{A \rho_f^{1-n} Q E} \left[\left(\frac{Y_F}{\mu_F} \right)^a \left(\frac{Y_{Ox}}{\mu_{Ox}} \right)^b \left(\frac{Y_{In}}{\mu_{In}} \right)^c \right]_0^{-1},$$

где Y и μ — массовая доля и молекулярная масса соответственно, индекс 0 относится к состоянию перед ударной волной, T_f и ρ_f — значения температуры и плотности газа на фронте ДВ, определяемые скоростью детонации D . Отношение теплоемкостей γ считаем постоянным и равным среднему значению между соответствующей величиной для исходных веществ и для продуктов сгорания, состав которых рассчитывается без учета диссоциации. Для трехатомных молекул H_2O и CO_2 в высокотемпературных продуктах сгорания для простоты $\gamma_3 = 8/7$. Тепловой эффект Q определяем по экспериментальным значениям скорости идеальной детонации D_0 по формуле $Q = D_0^2 / 2 (\gamma^2 - 1)$. Таким образом, уравнение кинетики химического превращения в ДВ имеет вид

$$d\beta/dt = -k\beta^n \exp(-E/RT)$$

с параметрами, определенными, как указано выше.

На основе результатов [5, 6] считаем, что в неустановившемся потоке за фронтом ДВ средний по зоне реакции коэффициент сопротивления $C_f \approx \xi$ (ξ — гидравлическое сопротивление трубы при установившемся течении). Тогда по закону Блазиуса

$$C_f \approx 0,3164 \text{Re}^{-0,25},$$

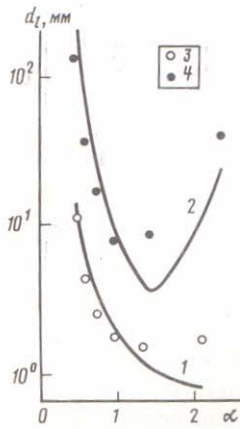


Рис. 1

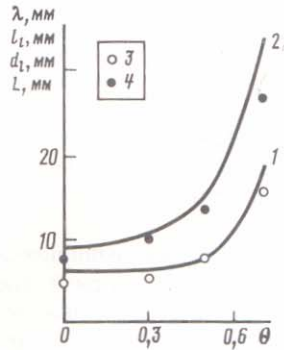


Рис. 2

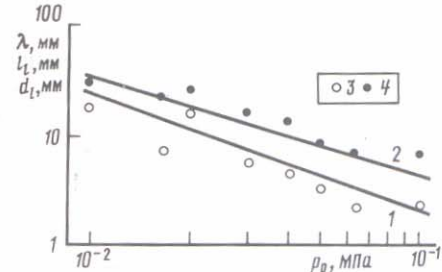


Рис. 3

Рис. 1. Расчетные (1, 2) и экспериментальные [2] (3, 4) зависимости предельного диаметра детонации от начального состава смеси. 1, 3 — C_2H_2 + воздух; 2, 4 — C_2H_4 + воздух

Рис. 2. Зависимости предельных динамических параметров детонации смеси $C_2H_2 + 7,6O_2 + Z Ar$ от объемного содержания Ar. 1 — d_l (расчет), 2 — l_l (расчет), 3 — λ (эксперимент [14]), 4 — L (эксперимент [14])

Рис. 3. Зависимости предельных динамических параметров детонации стехиометрической смеси C_2H_2 + воздух от начального давления. 1 — d_l (расчет), 2 — l_l (расчет), 3 — λ/π (эксперимент [4]), 4 — λ (эксперимент [4])

где $Re = \frac{u_f d}{\nu}$, u_f — скорость газа на фронте детонации, ν — кинематическая вязкость, определяемая из модели твердых сфер в кинетической теории газов [7]. В гладкой трубе справедлива аналогия Рейнольдса, поэтому коэффициент теплоотдачи в стенку трубы $C_n = C_f/2$.

Скорость D , входящая как параметр в стационарные уравнения сохранения массы, импульса и энергии [1, 5], а также в величины с индексом f и соотношения для потерь на трение и теплоотдачу, ищется пристрелкой по методу [5].

2. В табл. 1 приведены результаты расчетов для некоторых стехиометрических ТВС и ТКС. Рассчитанное значение предельного диаметра d_l (индексом l обозначены параметры на пределе детонации) сравнивается с величиной λ , измеренной в [2–4]. При принятых параметрах A, a, b, c, E_* [8–13] (см. табл. 1) $d_l \approx (0,3 - 1,2)\lambda$, причем для смесей 1–4, 6: $d_l \approx \lambda/\pi$. В табл. 1 указаны также расчетное относительное снижение скорости детонации на пределе $D_l D_0^{-1}$, отношение длины зоны реакции к диаметру трубы $l_l d_l^{-1}$ и недогорание смеси в плоскости Чепмена–Жуге (Ч–Ж) β_* . Величина $(D_0 - D_l) D_0^{-1}$ в соответствии с [1] не превышает 10–15%. Недогорание в плоскости Ч–Ж достигает 5–6%. Длина зоны реакции на пределе распространения детонации близка к предельному диаметру ($l_l \approx d_l$) и много больше длины зоны индукции самовоспламенения l_i , рассчитываемой без учета потерь ($l_l \gg l_i$). Фактически длина зоны реакции на пределе близка к размеру ячейки λ .

На рис. 1 приведены расчетные зависимости предельного диаметра детонации от начального состава (α — коэффициент избытка горючего) для воздушных смесей C_2H_2 и C_2H_4 при начальном давлении $p_0 = 0,1$ МПа. Отметим хорошее согласие расчетных значений d_l с величиной λ/π [3] для смесей, обедненных горючим. Используемые в расчетах эмпирические зависимости типа (1) получены именно для бедных смесей, что может служить объяснением различия результатов при $\alpha > 1$.

На рис. 2 проведено сравнение расчетных значений d_1 (1) и l_1 (2) со значениями λ (3) и продольного размера ячейки L (4) для детонации смеси $C_2H_2 + 7,6O_2 + Z Ar$ в зависимости от объемного содержания аргона $\theta = Z/(Z + 8,6)$ при $p_0 = 0,013$ МПа. Данные по скорости детонации D_0 и значения L взяты из [14]. Учтено, что ширина ячейки λ и ее длина L связаны эмпирическим соотношением $\lambda \approx 0,62L$ [2, 3]. Из рис. 2 видно, что $d_1 \approx \lambda$ и $l_1 \approx L$ в широком диапазоне θ . Отметим, что недогорание смеси в плоскости Ч–Ж достигало в расчетах 8%.

На рис. 3 показано сравнение расчетных значений предельного диаметра d_1 (1) со значениями λ/π (3) из [4] при разном начальном давлении стехиометрической смеси C_2H_2 –воздух, а также расчетной длины зоны реакции l_1 (2) с размером ячейки λ (4). Видно, что $d_1 \approx \lambda/\pi$ и $l_1 \approx \lambda$.

Таким образом, используемый на практике эмпирический критерий предела газовой детонации подтверждается одномерной теорией пределов, учитывающей потери импульса и энергии из зоны реакции ДВ. Полученные результаты показывают, что для ряда ТВС и ТКС предельный диаметр и длина зоны реакции на пределе весьма близки к поперечному размеру ячейки многофронтной ДВ. Для уточнения принятого приближенного подхода необходима дальнейшая информация о задержках воспламенения газовых смесей при уровне давления, соответствующем детонации.

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова
Академии наук СССР, Москва

Поступило
26 XII 1989

ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я.Б. – ЖЭТФ, 1940, т. 10, № 10, с. 542–564.
2. Knystautas R., Guirao C., Lee J.H. – Progr. Astronaut. and Aeronaut., 1984, vol. 94, p. 23–37.
3. Васильев А.А., Митрофанов В.В., Топчиян М.Е. – ФГВ, 1987, т. 23, № 5, с. 109–131.
4. Bull D.C., Elsworth J.E., Shuff P.J. et al. – Combust. and Flame, 1982, vol. 45, p. 7–21.
5. Зельдович Я.Б., Гельфанд Б.Е., Каждан Я.М. и др. – ФГВ, 1987, т. 23, № 3, с. 103–112.
6. Frolov S.M., Gelfand B.E., Medvedev S.P. XII Intern. Coll. on Dynamics of Expl. React. Systems. Ann–Arbor, 1989, p. 136.
7. Reid R.C., Prounitz J.M., Sherwood T.K. The Properties of Gases and Liquids. N.Y.: McGraw–Hill Book Co., 1977.
8. White D.R. Proc. XI Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh, 1967, p. 147–151.
9. Hidaka Y., Kataoka T., Suga M. – Bull. Chem. Soc. Japan, 1974, vol. 47, № 9, p. 2166–2171.
10. Schott G.L., Kinsey J.L. – J. Chem. Phys., 1958, vol. 29, p. 1177–1180.
11. Burcat A. et al. – Combust. and Flame, 1972, vol. 18, p. 115–123.
12. Заманский В.М., Борисов А.А. Механизм и промотирование самовоспламенения перспективных топлив. Итоги науки и техники. М.: ВИНТИ, 1989, т. 19.
13. Cheng R.K., Oppenheim A.K. – Combust. and Flame, 1984, vol. 58, № 2, p. 125–134.
14. Vandermeiren M., Van Tiggelen P.J. – Progr. Astronaut. and Aeronaut., 1986, vol. 94, p. 104–116.