

С. М. Фролов, Б. Е. Гельфанд

**ПРЕДЕЛЬНЫЙ ДИАМЕТР
РАСПРОСТРАНЕНИЯ ГАЗОВОЙ ДЕТОНАЦИИ В ТРУБАХ**

Используемый на практике эмпирический критерий предела газовой детонации подтверждается одномерной теорией пределов, учитывающей потери импульса и энергии из зоны реакции детонационной волны. Полученные результаты показы-

© 1991 Фролов С. М., Гельфанд Б. Е.

вают, что для ряда газовых смесей предельный диаметр и длина зоны реакции на пределе весьма близки к поперечному размеру ячейки многофронтной детонации.

Существование пределов детонации при распространении в трубах обусловлено взаимодействием потока за лидирующим фронтом 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 служит наблюдаемый экспериментально переход от многофронтной структуры ДВ к структуре с одной поперечной волной (одноголовый спин) [2, 3]. Поскольку одноголовый спин возникает при $\lambda = \pi d$ [3] (λ — поперечный размер ячейки, d — диаметр трубы), то определение предельного диаметра сводится к измерению или расчету 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 в некоторых случаях теоретически удастся 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 качественно согласуются с экспериментальными наблюдениями. Отметим, что подход, основанный на выборе определяющих параметров задачи, отражающих важнейшие особенности реального течения, в сочетании с одномерной теорией, по-видимому, вполне пригоден для установления пределов существования самоподдерживающихся ДВ. 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

$$\tau_i = \frac{c_v RT_f^2}{kQE} \beta_0^{-(n-1)} \exp \frac{E}{RT}$$

и эмпирической зависимости для задержки воспламенения

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

где c_v — теплоемкость; R — газовая постоянная; T — температура; k — предэкспонент в уравнении реакции аррениусовского типа; Q — тепловой эффект реакции; E — энергия активации; β_0 — исходная концентрация потребляемого реагента; 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 $n = 1 - (a + b + c)$, $E = E_*$,

$$k = \frac{c_v RT_f^2}{A \rho_f^{1-n} Q E} \left[\left(\frac{Y_F}{\mu_F} \right)^a \left(\frac{Y_{Ox}}{\mu_{Ox}} \right)^b \left(\frac{Y_{In}}{\mu_{In}} \right)^c \right]^{-1}.$$

Смесь	$A \cdot 10^{11} \cdot c \times \left(\frac{\text{МОЛЬ}}{\text{Л}} \right)^{-(a+b+c)}$	a	b	c	$\frac{E, \text{ ККАЛ}}{\text{МОЛЬ}}$	$\frac{D_l}{D_0}$	$\frac{l_l}{d_l}$	$\beta^* \gamma, \%$	$d_l, \text{ мм}$	$\lambda, \text{ мм}$	Ссылка
$C_2H_2 + 2,5O_2$	1,549	-0,67	-0,33	0	17,3	0,86	0,9	5	0,14	0,3	[8]
$C_2H_2 + \text{воздух}$	1,549	-0,67	-0,33	0	17,3	0,90	1,5	5	2,10	5,7	[8]
$C_2H_4 + 3O_2$	0,355	0	-1	0	27,5	0,92	0,8	4	0,19	0,56	[9]
$C_2H_4 + \text{воздух}$	0,355	0	-1	0	27,5	0,94	1,2	2,5	8,5	25	[9]
$H_2 + 0,5O_2$	2,254	0	-1	0	15,2	0,91	1,0	3	1,5	1,57	[10]
$H_2 + \text{воздух}$	2,254	0	-1	0	15,2	0,92	0,9	5	4	15	[10]
$C_2H_6 + \text{воздух}$	2,350	0,46	-1,26	0	34,2	0,96	0,9	0,8	52	60	[11]
$C_3H_8 + \text{воздух}$	28,0	0,29	-1,19	0,39	36,8	0,98	0,7	0,7	80	63	[12]
$CH_4 + \text{воздух}$	12 590	0,48	-1,94	0	46,2	0,98	1,0	0,7	500	330	[13]

Примечание. Погрешность расчета l_l , d_l и $\beta^* \gamma$ не более 5 % величин, указанных в таблице. Кинетические параметры выбраны на основе наилучшего соответствия условий измерения задержек воспламенения условиям в зоне индукции ДВ.

Здесь Y и μ — массовая доля и молекулярная масса, индекс нуль относится к состоянию перед ударной волной; T_f и ρ_f — значения температуры и плотности газа на фронте волны, 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 берем $\gamma_3 = 8/7$. Величину Q определяем по экспериментальным значениям скорости идеальной детонации D_0 и рассчитанному значению γ :

$$Q = D_0^2 / 2 (\gamma^2 - 1).$$

Таким образом, уравнение кинетики химического превращения в ДВ имеет вид

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

(параметры определены как указано выше).

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

$$C_f = 0,3164 / \text{Re}^{0,25},$$

где $\text{Re} = u_f d / \nu$; u_f — скорость газа на фронте детонации; ν — кинематическая вязкость, определяемая по формуле из кинетической теории газов [7]:

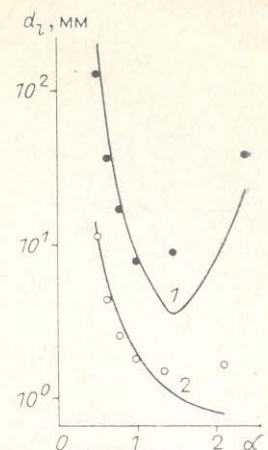
$$\nu = 26,69 \cdot 10^{-6} (\mu T_f)^{0,5} / r_M^2 \rho_f, \text{ П.}$$

Здесь r_M — радиус молекулы смеси в модели твердых сфер, Å; μ — средняя молекулярная масса. В гладкой трубе справедлива аналогия Рейнольдса, поэтому коэффициент теплоотдачи в стенку трубы $C_H = C_f / 2$.

Скорость детонации D , входящая как параметр в стационарные уравнения сохранения массы, количества движения 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. Значение предельного диаметра d_l (ин-

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



дексом l обозначены в дальнейшем параметры на пределе детонации) сравниваются с величиной λ , измеренной в [2—4]. При принятых параметрах A , a , b , c , E_* (см. табл. 1) в выражении для задержки воспламенения (1) [8—13] $d_l \approx (0,3 \div 1,2) \lambda$, причем для смесей 1—4, 6: $d_l \approx \lambda/\pi$. В табл. 1 указаны также расчетные величины относительного снижения скорости детонации на пределе $D_l D_0^{-1}$, отношение длины зоны реакции l_i к диаметру трубы d_l и недогорание смеси в плоскости Чепмена — Жуге β_* . Величина $(D_0 - D_l)/D_0^{-1}$ в соответствии с [1] не превышает 10—15%. Недогорание в плоскости Чепмена — Жуге достигает 5—6%. Длина зоны реакции на пределе распространения детонации близка к предельному диаметру, т. е. $l_i \approx d_l$ и много больше длины зоны индукции самовоспламенения l_i , рассчитываемой без учета потерь ($l_i \gg l_i$). Фактически длина зоны реакции на пределе близка к размеру ячейки λ .

На рис. 1 и в табл. 2 приведены расчетные зависимости предельного диаметра и других параметров детонации от начального состава (α — коэффициент избытка горючего) при начальном давлении $p_0 = 0,1$ МПа. Отметим хорошее согласие расчетных значений d_l с величиной λ/π [3] для составов, 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_l и l_i со значениями λ и продольного размера ячейки L в зависимости от объемного содержания аргона $\theta = Z/(Z + 8,6)$ при $p_0 = 0,013$ МПа. Данные по скорости детонации D_0 и величины L взяты из [14]. Учтено, что λ и L связаны эмпирическим соотношением $\lambda \approx 0,62L$ [2, 3]. Из рис. 2 видно, что $d_l \approx \lambda$ и $l_i \approx L$ в широком диапазоне степени разбавления смеси аргоном. Отметим, что недогорание смеси в плоскости Чепмена — Жуге достигало в расчетах 8%. Из рис. 3, где сравниваются расчетные значения с экспериментом, видно, что $d_l \approx \lambda/\pi$ и $l_i \approx \lambda$.

Таблица 2

Смесь	α	D_0 , м/с	μ , кг	γ	Q , МДж	n	E , ккал	D_l/D_0	l_i , мм	λ , мм	β_* , %
			кмоль		кг		моль				
C_2H_2 — воздух	0,50	1600	28,73	1,358	1,517	2	17,3	0,925	20	29	4
	0,63	1700	28,70	1,349	1,762	2	17,3	0,905	10	12,6	6
	0,76	1770	28,67	1,341	1,962	2	17,3	0,895	6	8,5	6
	1,0	1864	28,62	1,328	2,276	2	17,3	0,906	3,4	5,7	5
	1,32	1940	28,56	1,320	2,538	2	17,3	0,870	2,4	4	6,5
	2,1	2020	28,42	1,303	2,923	2	17,3	0,890	1,3	4,9	6
C_2H_4 — воздух	0,52	1500	28,81	1,353	1,354	2	27,5	0,967	218	250	1,1
	0,63	1610	28,80	1,348	1,588	2	27,5	0,960	59	100	1,6
	0,75	1700	28,80	1,340	1,816	2	27,5	0,950	26	57	2,1
	1,0	1822	28,78	1,327	2,183	2	27,5	0,940	10	25	2,5
	2,34	1775	27,72	1,293	2,345	2	27,5	0,960	23	140	1,5

Примечание. Представлены экспериментальные значения D_0 и λ .

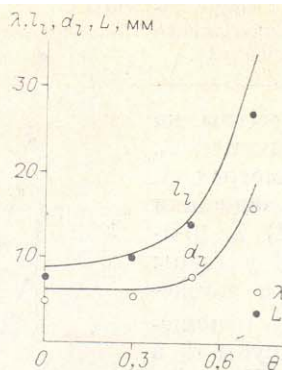


Рис. 2. Зависимости предельных динамических параметров детонации смеси $C_2H_2 + 7,6O_2 + ZAr$ от объемного содержания Ar (линии — расчет, точки — эксперимент [14]).

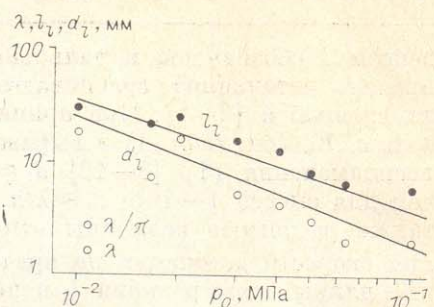


Рис. 3. Зависимости предельных динамических параметров детонации стехиометрической смеси C_2H_2 — воздух от начального давления (линии — расчет, точки — эксперимент [4]).

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. Принятый приближенный подход к описанию процесса химического превращения не всегда справедлив, так как эксперименты по измерению задержек воспламенения проводятся, как правило, с сильно разбавленными смесями при относительно низких давлениях.

В связи с этим имеется насущная задача получения информации об особенностях самовоспламенения реальных газовых смесей при уровне давления, соответствующем процессу детонации. Для многих горючих, представляющих практический интерес, такого рода информация проще всего может быть получена опытным путем, поскольку детальные кинетические схемы химических превращений в зоне реакции детонационной волны не существуют.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я. Б. // ЖЭТФ.— 1940.— № 10.— С. 542.
2. Knystautas R., Guirao C., Lee J. H. // Progr. Astron. Aeron.— 1984.— N 94.— P. 23.
3. Васильев А. А., Митрофанов В. В., Топчий М. Е. Детонационные волны в газах // ФГВ.— 1987.— 23, № 5.— С. 109.
4. Bull D. C., Elsworth J. E., Shuff P. J. et al. // Comb. Flame.— 1982.— 45, N 7.
5. Зельдович Я. Б., Гельфанд Б. Е., Каждан Я. М. и др. Распространение детонации в шероховатой трубе с учетом торможения и теплоотдачи // ФГВ.— 1987.— 23, № 3.— С. 103.
6. Frolov S. M., Gelfand B. E., Medvedev S. P. // 12th ICDERS.— Ann-Arbor, 1989.
7. Reid R. C., Prousnitz J. M., Sherwood T. K. The properties of gases and liquids, McGraw-Hill Book Co., 1977.
8. White D. R. // Proc. 11th Symp. (Int.) on Combust.— Pittsburgh, 1967.
9. Hidaka Y., Kataoka T., Suga M. // Bull. Chem. Soc. Japan.— 1974.— 47, N 9.— P. 2166.
10. Schott G. L., Kinsey J. L. // J. Chem. Phys.— 1958.— 29.— P. 1177.
11. Burcat A. et al. // Comb. Flame.— 1972.— 18.— P. 115.
12. Заманский В. М., Борисов А. А. Механизм и промотирование самовоспламенения перспективных топлив // Итоги науки и техн./ВИНИТИ.— 1989.— 19.
13. Cheng R. K., Oppenheim A. K. // Comb. Flame.— 1984.— 58, N 2.— P. 125.
14. Vandermeiren M., Van Tiggelen P. J. // Progr. Astron. Aeron.— 1986.— N 94.— P. 104.

г. Москва

Поступила в редакцию 29/XI 1989,
после доработки — 11/V 1990