

01;03

Роль межфазных взаимодействий при газовой детонации в инертной пористой среде

© Д.М. Балапанов, С.Ф. Урманчиев

Институт механики Уфимского научного центра РАН, Уфа
E-mail: daniyarius@gmail.com

Поступило в Редакцию 4 февраля 2010 г.

Предлагается математическая модель детонации в двухфазной смеси, состоящей из унитарного газового топлива и плотно упакованных твердых частиц из негорючего материала. Проведено сравнение структуры детонационных волн в чистом газе и в монодисперсных смесях, отличающихся диаметром частиц. Выделено два режима детонации: в первом из них газ загорается сразу, за счет ударного сжатия, а во втором — начиная с поверхности частиц, при отражении ударного фронта. Показано, что инерционные эффекты при обтекании частиц могут как увеличивать скорость детонации, так и уменьшать ее. Рассчитанные скорости детонации хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Распространение волн горения по газовой смеси, насыщающей поровое пространство инертной пористой среды, представляет интерес как с теоретической, так и с прикладной точки зрения в связи с обеспечением пожаро- и взрывобезопасности газовых систем с применением пористых огнепреградителей. Влияние свойств пористой среды на основные закономерности детонации насыщающего газа экспериментально изучались в [1–3]. Полученные в этих работах результаты указывают на то, что механизмы поддержания детонации могут быть различными в зависимости от начального давления газовой смеси. Математической теории, подтверждающей данные соображения, до сегодняшнего дня не существует. Теория детонации с потерями [4] применима только для течения в прямом канале без учета нестационарных эффектов и не может объяснить существование режима детонации, существующего при низких начальных давлениях газа.

Предлагаемая модель описывает волны химической реакции в горючей газовой смеси, заполняющей поровое пространство плотной

гранулярной насыпки. Частицы скелета являются шарами одинакового диаметра d_0 , достаточно мелкими, чтобы в масштабах задачи выполнялось условие сплошности твердой фазы. При не слишком больших давлениях, возникающих при взрыве газа, скелет насыпки можно считать неподвижным и несжимаемым. Поскольку детонация распространяется с высокой скоростью, конденсация продуктов реакции не может оказать влияния на форму волны.

Динамика системы „газ–частицы“ описывается в рамках двухконтинуального подхода [5] в одномерной постановке. Система дифференциальных уравнений модели имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_G}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_G v_G) &= 0; & \frac{\partial}{\partial t}(\rho_G v_G) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_G v_G^2 + p_G) &= \frac{F}{\alpha_G}; \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho_G \left[U_G + \frac{v_G^2}{2} \right] \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_G v_G \left[U_G + \frac{v_G^2}{2} + \frac{p_G}{\rho_G} \right] \right) &= \frac{Q}{\alpha_G}; \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho_G \varphi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_G v_G \varphi) &= \frac{J_\varphi}{\alpha_G}; \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho_G \mu_G) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_G v_G \mu_G) &= \frac{J_\mu}{\alpha_G}; & \frac{\partial T_S}{\partial t} &= \frac{Q}{\alpha_S \rho_S c_S}. \end{aligned} \quad (1)$$

Сюда входят приведенные к дивергентной форме уравнения неразрывности, импульса и полной механической энергии для газовой фазы, два уравнения кинетики горения и уравнение притока тепла для твердой фазы. Используются следующие обозначения: t — время; x — координата в направлении распространения волны; α_i , ρ_i , U_i , T_i — соответственно: объемное содержание, истинная плотность (масса фазы в единице ее объема), удельная внутренняя энергия и температура i -й фазы ($i = G, S$); μ_G , v_G и p_G — молярная масса, скорость и давление газа соответственно; φ — оставшаяся часть времени индукции; F — сила трения, действующая на поток газа со стороны скелета, Q — интенсивность теплового потока между фазами; c_S — постоянная удельная теплоемкость частиц скелета. Нижний индекс G относится к параметрам газовой фазы („gas“), S — твердой фазы („solid“). Объемные концентрации фаз связаны естественным соотношением: $\alpha_G + \alpha_S = 1$.

В [6] предложено калорическое уравнение состояния продуктов реакции с учетом диссоциации и возбуждения колебаний молекул при

высоких температурах:

$$U_G = \left(\frac{1}{\mu_a} + \frac{1}{2\mu_G} + \beta \left[\frac{1}{\mu_a} - \frac{1}{\mu_G} \right] \frac{\theta/T_G}{\exp(\theta/T_G) - 1} \right) RT_G + E_\mu \left(\frac{1}{\mu_G} - \frac{1}{\mu_{\min}} \right), \quad (2)$$

где R — универсальная газовая постоянная; μ_a , β , μ_{\min} , E_μ , θ — термодинамические константы. Тестовые расчеты показали, что уравнение (2) можно использовать и для исходной смеси с ошибкой по давлению, не превышающей погрешности измерений в экспериментах [1]. В качестве термического уравнения состояния применялось уравнение Менделеева–Клапейрона.

Химическая реакция описывается двухстадийной моделью кинетики. На первой стадии (индукция, $0 < \varphi < 1$) происходит накопление активных центров, а выделения тепла не происходит. По истечении периода индукции начинают протекать существенно экзотермические трехмолекулярные реакции. Как показано в [6], при высоких температурах состав смеси достаточно точно может быть определен с помощью единственной переменной — молярной массы. Поэтому система уравнений кинетики сводится к одному дифференциальному уравнению для первой стадии и к одному — для второй. Скорость реакции на экзотермической (J_μ) и индукционной (J_φ) стадиях, как и в [7], задается зависимостями:

$$J_\mu = \begin{cases} 0, & \varphi > 0, \\ k_\mu \frac{\kappa^n}{T_G} \frac{\rho_G^3}{\mu_G} y_d^2 \widehat{M} \left(1 - \frac{\psi}{\psi_e} \right), & \varphi = 0; \end{cases}$$

$$\kappa = \frac{1/\mu_{\min} - 1/\mu_G}{1/\mu_{\min} - 1/\mu_{\max}}; \quad y_d = \frac{\mu_G}{\mu_{\min}} (1 - \kappa)^{1+n};$$

$$\psi_e = \frac{\rho_G}{\rho_*} \kappa_* (1 - \kappa_*)^{-2(1+n)} \frac{T_G^{-0.5} (1 - \exp(-\theta/T_G))^{-\beta} \exp(E_\mu/RT_G)}{T_*^{-0.5} (1 - \exp(-\theta/T_*))^{-\beta} \exp(E_\mu/RT_*)}, \quad (3)$$

$$\widehat{M} = M_{\min} + (M_{\max} - M_{\min}) \kappa^5; \quad \psi = \kappa (1 - \kappa)^{-2(1+n)};$$

$$J_\varphi = -k_\varphi \rho_G^2 \exp\left(-\frac{E_\varphi}{RT_G}\right),$$

где μ_{\max} , n , k_μ , M_{\min} , M_{\max} , k_φ , E_φ , ρ_* , T_* , κ_* — термодинамические константы.

Силу сопротивления F , которая действует на газ со стороны скелета, на основании решения задачи об обтекании одиночной сферы [5] можно представить в следующем виде:

$$F = F_\eta + F_m + F_A;$$

$$F_\eta = -\alpha_G \alpha_S K_\eta \frac{\eta_G v_G}{d_0^2}; \quad F_m = -\frac{1}{2} \alpha_G \alpha_S K_m \rho_G \frac{dv_G}{dt}; \quad F_A = -\alpha_G \alpha_S \rho_G \frac{dv_G}{dt};$$

$$K_m = \frac{1 + \alpha_G}{2\alpha_G}; \quad K_\eta = \frac{9}{2} \frac{\alpha_S}{\alpha_G^4} f_\eta; \quad f_\eta = \begin{cases} 36.4 + 0.45 \text{Re}_e, & \text{Re}_e < 2 \cdot 10^3, \\ 1.09 \text{Re}_e^{0.86}, & \text{Re}_e \geq 2 \cdot 10^3; \end{cases} \quad (4)$$

$$\text{Re}_e = \frac{\rho_G v_e d_e}{\eta_G}; \quad d_e = \frac{2\alpha_G}{3\alpha_S} d_0; \quad v_e = \frac{v_G}{\alpha_G}.$$

Слагаемые в (4) имеют следующий смысл: F_η — квазистационарная сила вязкого трения, F_m — сила присоединенных масс, F_A — сила Архимеда. Последние два слагаемых описывают родственные нестационарные силы, обусловленные инерционными эффектами при обтекании. η_G обозначена динамическая вязкость газа. Коэффициентами K_η и K_m учитываются стесненность частиц и условия обтекания. При выводе выражения для K_η в [8] учитывался тот факт, что при течении газа в искривленных поровых каналах с эффективным гидравлическим радиусом d_e истинная скорость обтекания частиц скелета v_e больше усредненной по сечению скорости v_G на коэффициент $1/\alpha_G$. Ввиду большого различия в плотностях фаз слагаемым Бассэ [5] в F можно пренебречь.

Скорости теплообмена фаз определялись по следующим формулам [5]:

$$Q = \frac{6\alpha_S}{d_0^2} \lambda_G \text{Nu} (T_S - T_G); \quad \text{Nu} = \begin{cases} 0.395 \text{Re}_e^{0.64} \text{Pr}^{1/3}, & 30 < \text{Re}_e < 5 \cdot 10^5, \\ 0.725 \text{Re}_e^{0.47} \text{Pr}^{1/3}, & 2 < \text{Re}_e < 30, \end{cases} \quad (5)$$

где λ_G — теплопроводность газа. Зависимость числа Нуссельта газа Nu от чисел Рейнольдса Re_e и Прандтля $\text{Pr} = c_p \eta_G / \lambda_G$ рекомендована в [8]. Изобарная теплоемкость газа c_p вычислялась согласно [6]. Коэффициенты переноса η_G и λ_G рассчитывались по теории Чепмена–Энскога, как описано в [7].

Система уравнений (1)–(5) с замыкающими соотношениями интегрируется численно с применением концепции расщепления шагов по времени [9] по различным физическим процессам. Газодинамическое ядро системы решается методом WENO 5-го порядка точности по пространству.

Влияние межфазных взаимодействий на форму и скорость детонационной волны изучалось на модельных расчетах в области длиной 10 см. Расчеты были выполнены для смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$. Параметры фаз следующие: $\rho_S = 7.8 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, $c_S = 460 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, $\mu_a = \mu_{\min} = 6 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, $\beta = 3$, $E_\mu = 0.46 \text{ MJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, $\theta = 7607 \text{ K}$, $\mu_{\max} = 18 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, $n = 0.1364$, $k_\mu = 1.51 \cdot 10^6 \text{ K} \cdot \text{m}^6 \cdot \text{mol}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, $M_{\min} = 1.3833$, $M_{\max} = 6.5$, $k_\varphi = 5.81 \cdot 10^8 \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, $E_\varphi = 71.8 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, $\rho_* = 0.302 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $T_* = 4200 \text{ K}$, $\chi_* = 0.6263$. В начальный момент времени исходная газовая смесь ($\mu_0 = 12 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, $\varphi = 1$) покоится при одинаковой со скелетом температуре $T_0 = 298 \text{ K}$. На краях расчетной области ставились граничные условия, моделирующие жесткую стенку. Вблизи левого края моделировался инициирующий нагрев с мощностью $10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$, в результате которого зарождается и распространяется вправо волна детонации. Область инициирования на графиках не отражена.

На рис. 1 представлены эпюры давления и скорости течения газа в волнах детонации для сред, отличающихся по d_0 . Начальное давление $p_0 = 1 \text{ МПа}$. Как следует из рис. 1, *a* амплитуда и длительность (положительность заднего фронта) детонационного солитона монотонно убывают с уменьшением d_0 . Это объясняется тем, что в мелкодисперсной насыпке поверхность контакта фаз велика, что интенсифицирует потери тепла и импульса продуктами реакции. Волна детонации в пористой среде характеризуется значительно более тонкой областью спутного течения газа за фронтом, чем при детонации чистого газа (рис. 1, *b*). Гидравлическое сопротивление скелета приводит к быстрому торможению потока горячего газа и образуется застойная зона Z , где $v_G = 0$ (рис. 1, *c*), а p_G , T_G и μ_G постоянны (рис. 2). Состояние газа в Z неустойчиво, так как происходит межфазный теплообмен, приводящий к падению давления в охлажденной области. Газ устремляется в область пониженного давления, его температура уменьшается быстрее (рис. 2, *a*) из-за роста числа Нуссельта и формируется вторая, отделенная от первой плато Z , часть волны разрежения. Здесь, в отличие от детонации чистого газа,

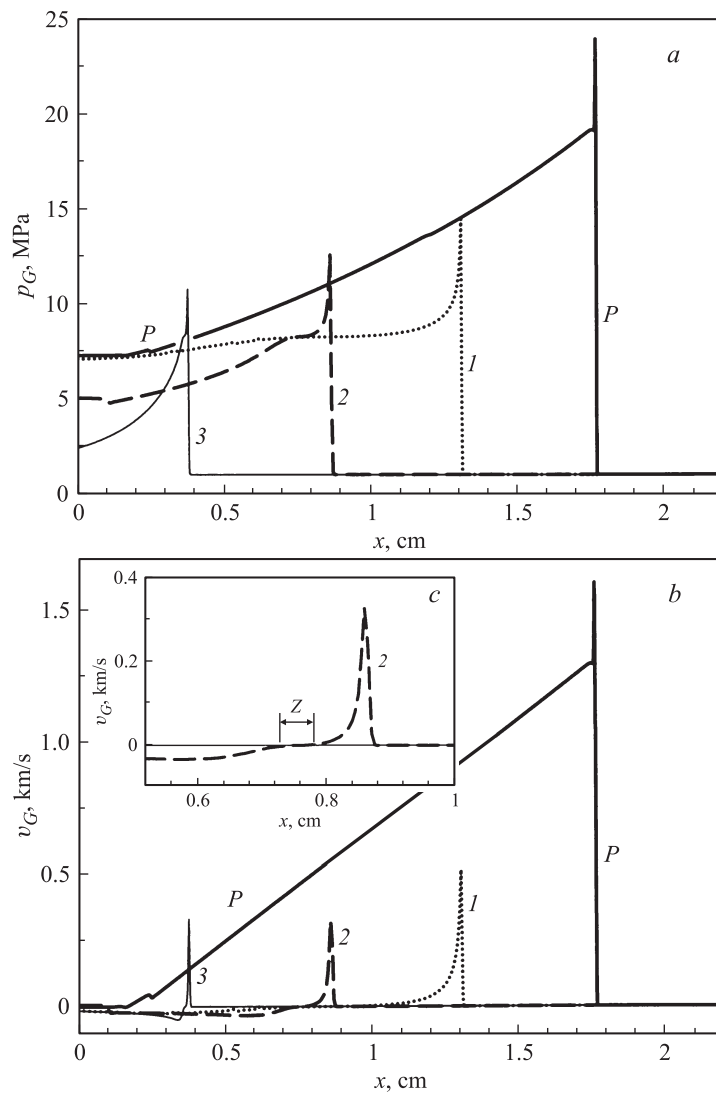


Рис. 1. Эпюры давления (а) и скорости газа (b) при детонации в чистом газе (P) и в насыпках с различным диаметром частиц d_0 : $900 \mu\text{m}$ (1), $425 \mu\text{m}$ (2), $180 \mu\text{m}$ (3). На вставке c приведено более детальное изображение кривой 2 с фрагмента b.

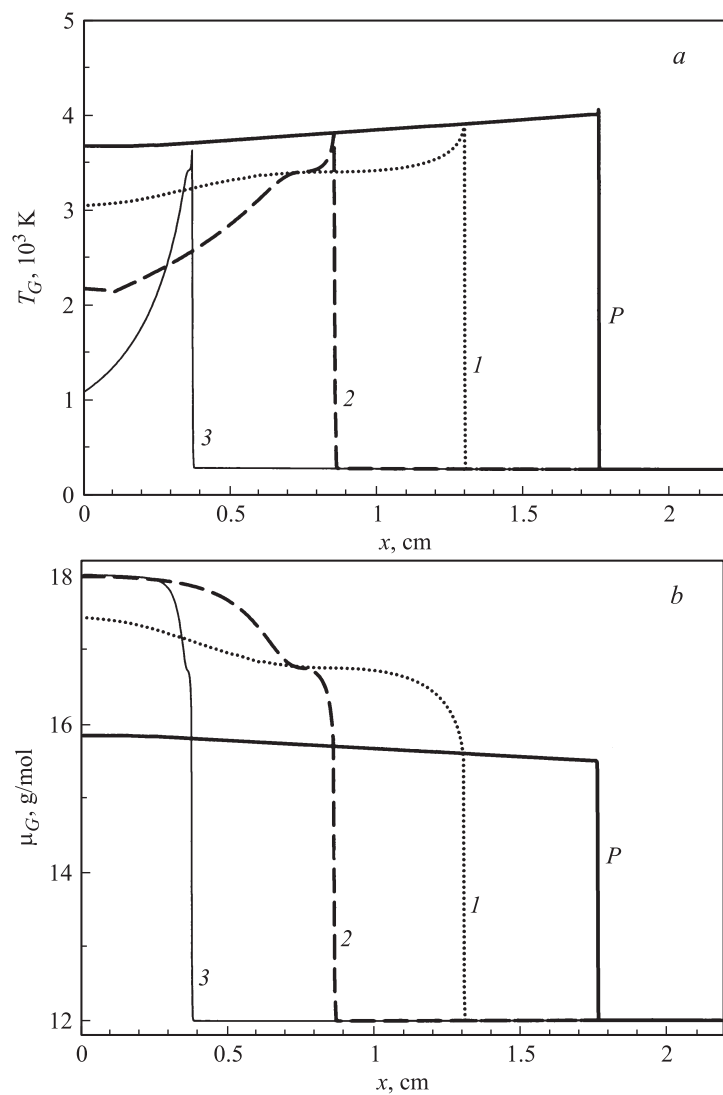


Рис. 2. Эпюры температуры (a) и молярной массы газа (b) при детонации в чистом газе (P) и в насыпках с различным диаметром частиц d_0 : 900 μm (1), 425 μm (2), 180 μm (3).

$v_G < 0$, т.е. поток продуктов реакции направлен против движения волны. Размер плато прямо пропорционален скорости распространения волны D .

Как в пористой среде, так и в чистом газе экзотермическая стадия реакции при ударном сжатии протекает очень быстро, и молярная масса увеличивается скачком (рис. 2, *b*), после чего по мере остывания газ диссоциирует (μ_G растет плавно). В чистом газе эти процессы разделены резким переломом на кривой P , а в пористой среде они плавно переходят друг в друга. За счет более быстрого остывания продуктов реакции кривые 1, 2, 3 всюду лежат выше кривой P .

Наличие межфазного теплообмена и квазистационарной силы Стокса, как следует из рис. 3, *a*, приводит к существенному снижению скорости волны по сравнению с детонацией в чистом газе. Однако без учета сил Архимеда и присоединенных масс расчетные скорости детонации остаются сильно завышенными по сравнению с результатами [1] и с ростом p_0 приближаются к значениям D в чистом газе. Учетом инерционных эффектов обеспечивается не только значительно лучшее совпадение с экспериментом в области высоких давлений, но и существование детонации при давлениях ниже p_r , где обрывается кривая 2. Действие инерционных сил, связанное с отражением ударного фронта от гранул скелета, приводит к повышению пикового давления в волне детонации и запуску реакции горения. Пересечение кривых 2 и 3 в точке p_{inv} указывает на то, что при $p_0 < p_{inv}$ отражения „разгоняют“ волну за счет увеличения скорости реакции, а при $p_0 > p_{inv}$ — „замедляют“ за счет потерь энергии.

На рис. 3, *b* показаны эпюры давления, соответствующие учету различных взаимодействий. Расчет сделан для $p_0 = 0.3$ МПа. Волна разрежения, следующая за головным скачком давления, имеет разную природу: в чистом газе это есть следствие адиабатического расширения продуктов реакции, а при детонации в пористой среде волна разрежения формируется из-за отвода тепла к скелету. Квазистационарное межфазное трение затрудняет течение газа, уменьшая число Нуссельта и ухудшая условия теплообмена. Поэтому волна разрежения на кривой 3 более пологая, чем на кривой 1.

Благодаря особому механизму поддержания горения в пористых средах наблюдается распространение детонации газа со скоростями, лишь немного превышающими звуковую. Структура волны существенно отличается от наблюдаемой в чистом газе. Предложенная модель

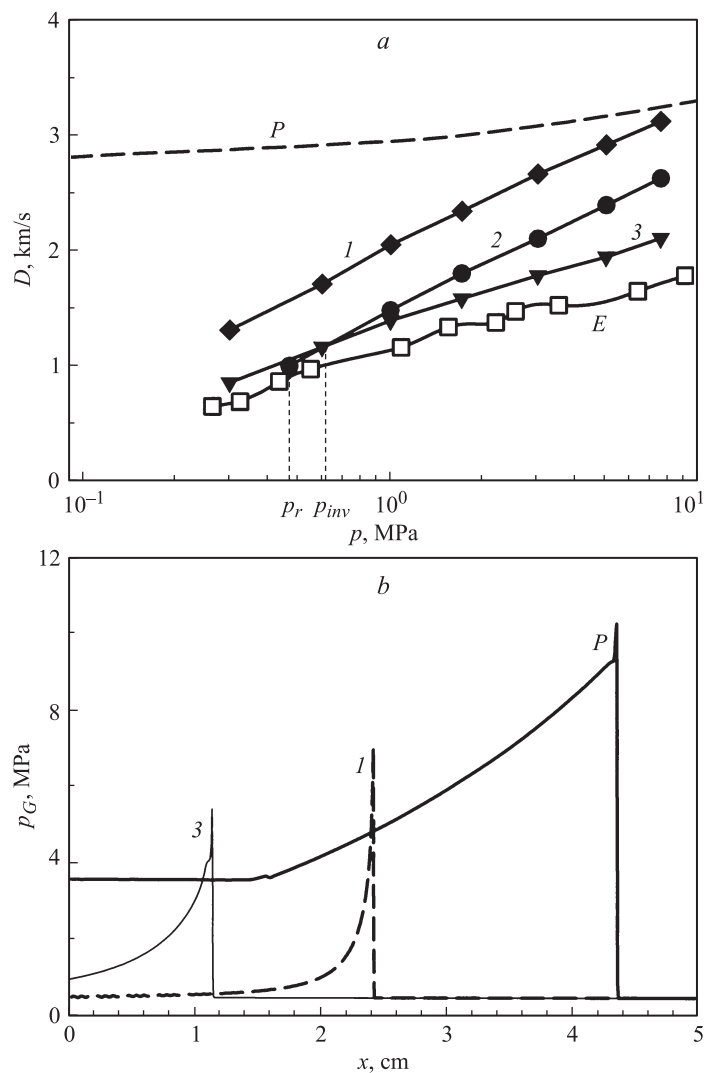


Рис. 3. Зависимость скорости детонации от начального давления газа (а) и распределение давления в волне детонации (b): 1 — расчет для насыпки с диаметром частиц $d_0 = 425 \mu\text{m}$, с учетом Q ; 2 — то же, с учетом F_η ; 3 — то же, с учетом Q , F_η , F_A и F_m ; P — расчет для чистого газа; E — результаты эксперимента [1].

правильно предсказывает скорости детонации, что подтверждается сопоставлением с экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке Президента РФ по государственной поддержке ведущих научных школ НШ-3483.2008.1 и гранта РФФИ № 08-01-97033 р_поволжье_а.

Список литературы

- [1] *Лямин Г.А., Пинаев А.В.* // Докл. АН СССР. 1985. Т. 283. № 6. С. 1351–1354.
- [2] *Пинаев А.В., Лямин Г.А.* // Физика горения и взрыва. 1989. Т. 25. № 4. С. 75–85.
- [3] *Мамонтов Г.М., Митрофанов В.В., Субботин В.А.* // Сб. тр. „Химическая физика процессов горения и взрыва. Детонация“. Черноголовка, 1980. С. 106–110.
- [4] *Зельдович Я.Б., Компанец А.С.* Теория детонации. М.: ГИТТЛ, 1955. 268 с.
- [5] *Нигматулин Р.И.* Динамика многофазных сред: Т. 1. М.: Наука, 1987. 464 с.
- [6] *Николаев Ю.А.* // Физика горения и взрыва. 2001. Т. 37. № 1. С. 6–15.
- [7] *Балапанов Д.М., Урманчиев С.Ф.* // Сб. тр. XIII Всероссийской конференции-школы „Современные проблемы математического моделирования“. Абрау-Дюрсо, 2009. Ростов-на-Дону: Изд-во ЮФУ, 2009. С. 76–84.
- [8] *Аэров М.Э., Тодес О.М., Наринский Д.А.* Аппараты со стационарным зернистым слоем: Гидравлические и тепловые основы работы. Л.: Химия, 1979. 176 с.
- [9] *Яненко Н.Н.* Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967. 197 с.