

01;03

Оценка размера детонационной ячейки в газах

© В.В. Кучинский, И.И. Оносов

Научно-исследовательское предприятие гиперзвуковых систем
196066 Санкт-Петербург, Россия,
e-mail: AJAX@COMSET.NET

(Поступило в Редакцию 6 сентября 2010 г.)

Рассмотрен простой метод расчета параметров ударной волны в пространстве между фронтом ударной волны и плоскостью Жуге. Решение уравнения для скорости позволяет рассчитать поведение давления, плотности и температуры и определить размер области детонации в одномерном приближении. Получены зависимости размера области детонации от входных параметров, позволяющие оценить ход аналогичных зависимостей в реальной ситуации.

Введение

Данная работа посвящена сравнительному анализу поведения параметров детонации в области горения и, в частности, анализу зависимости размеров области детонации от параметров эксперимента.

Как известно, широко используемая модель детонации Зельдовича–Неймана–Дюринга, являясь идеальным приближением, не описывает реальных детонационных волн, которые распространяются в форме многофронтной, или ячеистой, детонации. Детонационный фронт при этом состоит из участков пересжатой и затухающей детонационных волн, соединяющихся в тройных точках, из которых выходят также поперечные волны. Система поперечных волн, движущихся в противоположных направлениях, является регулярной, а траектории тройных точек при распространении фронта формируют картину в виде некоторых ячеек [1–7,9–12]. Таким образом, использование одномерной модели не соответствует реальному поведению детонации. Однако авторы многих работ, в частности, работы [2] отмечают, что „одномерная теория хорошо описывает процесс, если не рассматривать «тонкую структуру» детонационной волны. Вычисленные по одномерной теории величины скорости детонации, давления, плотности и температуры за фронтом хорошо совпадают с экспериментальными“ [2].

В данной работе использовано одномерное приближение для вычисления поведения ударной волны в области горения. Оценка размера детонационной ячейки (т.е. расстояния между фронтом ударной волны и плоскостью Жуге) проводится решением простого уравнения. Одновременно получаются распределения давления, плотности и температуры в этой области.

Наш расчет является продолжением подхода Зельдовича–Неймана–Дюринга и в момент, когда скорость ударной волны (в системе координат, связанной с фронтом ударной волны) равна локальной скорости звука, значения плотности, давления и температуры равны соответствующим значениям, вычисленным по теории Зельдовича–Неймана–Дюринга. Принимая во внимание

высказанное выше соображение о неплохой применимости одномерного подхода, можно надеяться, что размер области детонации (который является интегралом от скорости по времени) будет давать полезную оценку истинного значения параметра. Простой одномерный расчет может оказаться также полезным для выяснения качественных зависимостей размеров области детонации от входных параметров задачи.

Данный подход является естественным продолжением работ по распространению ударных волн в плазме [8], которая выделяет дополнительную энергию при прохождении через нее ударной волны (УВ).

Постановка задачи и основные уравнения

Рассматривается одномерная плоская УВ, идущая в потоке газа, причем в окрестности ударного фронта в результате специфических свойств УВ возникает источник тепла, который движется вместе с фронтом ударной волны. Система нестационарных уравнений, описывающая параметры ударной волны при наличии движущегося в направлении оси x со скоростью w источника тепла, имеет вид [13]

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + P - \frac{4}{3}\mu \frac{\partial u}{\partial x}) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\frac{1}{2}\rho u^2 + \rho e) + \frac{\partial}{\partial x}\{(\frac{1}{2}u^2 + e)\rho u + (P - \frac{4}{3}\mu \frac{\partial u}{\partial x})u - \lambda_r \frac{\partial T}{\partial x}\} - Q(x - wt) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где ρ , u , e — соответственно плотность, массовая скорость и внутренняя энергия газа, μ — вязкость газа, P — статическое давление, λ_r — коэффициент теплопроводности, T — абсолютная температура газа, Q — поступающая в единицу объема мощность. Рассматривается решение системы (1), стационарное в системе координат $\xi = x - wt$, движущейся со скоростью w . В качестве искомой функции взята скорость $v = w - u$, что, очевидно, соответствует выбору системы координат, движущейся с

источником. В результате ряда преобразований [13] для функции

$$\bar{v}(z) = \frac{v(z)}{v_1},$$

$$\left(z = \frac{3\rho_1 a_1 (M^2 - 1)}{4\mu\gamma M} (x - wt), \quad \gamma = \frac{c_p}{c_v} \right), \quad (2)$$

(где M, ρ_1, a_1 имеет смысл числа Маха, плотности и скорости звука на плюс бесконечности в невозмущенной области; соответствующие параметры отмечаются индексом „1“), получается уравнение третьего порядка [8]:

$$\lambda e^{-\alpha z} \frac{d}{dz} \left(e^{\alpha z} \frac{dF(z)}{dz} \right) + \frac{\beta}{4} \omega(z) = 0,$$

$$\lambda = \frac{1}{a} = \frac{M^2 - 1}{\gamma M^2} \quad \left(0 \leq \lambda < \frac{1}{\gamma} \right),$$

$$F(z) = \frac{1}{a^2} (\bar{v} - 1)(1 - \bar{v} - \alpha) - \frac{1}{\alpha} \bar{v} \frac{d\bar{v}}{dz}$$

$$\left(\alpha = \frac{2(M^2 - 1)}{M^2(\gamma + 1)} \right) \quad (3)$$

или в развернутом виде

$$\frac{d^3 \bar{v}}{dz^3} = \frac{1}{\alpha \bar{v}} \left\{ - \left[\alpha \bar{v} + \lambda 3\alpha \frac{3\bar{v}}{dz} + \alpha - 2 + 2\bar{v} \right] \frac{d^2 \bar{v}}{dz^2} - \left[\alpha + 2\lambda \right] \left(\frac{d\bar{v}}{dz} \right)^2 + (2 - 2\bar{v} - \alpha) \frac{d\bar{v}}{dz} + \frac{\alpha^2 \beta}{4} \omega(z) \right\}. \quad (4)$$

Для детонационной волны безразмерный параметр β

$$\beta = \frac{8\mu}{3} \frac{\gamma(\gamma^2 - 1)M^2}{\rho_1^2 a_1^4 (M^2 - 1)^3} Q_0, \quad (5)$$

Q_0 — мощность, выделяемая при горении топлива в единице объема (W/m^3), а безразмерная функция энерговыклада $\omega(z)$ есть экспонента из закона Аррениуса

$$\omega(z) = \begin{cases} e^{-\frac{E}{RT(z)}} & T(z) > T_f \\ 0 & T(z) < T_f, \end{cases}$$

$$T(z) = T_1 \left[1 + \gamma M^2 (1 - \bar{v}(z)) - \alpha M^2 \frac{\gamma + 1}{2} \frac{d\bar{v}(z)}{dz} \right] \bar{v}(z) \quad (6)$$

(выражение для температуры T_z взято из работы [13]), T_1 — температура в невозмущенной области, R — газовая постоянная, E — энергия активации, T_f — температура воспламенения. Для численного решения уравнения (3) и (4) удобно представить в виде системы уравнений относительно неизвестных функций $\bar{v}(z), F(z)$:

$$\begin{cases} \frac{1}{\alpha} \bar{v} \frac{d\bar{v}}{dz} = \frac{1}{\alpha^2} (\bar{v} - 1)(1 - \bar{v} - \alpha) - F(z), \\ \lambda \frac{d^2 F}{dz^2} = -\frac{dF}{dz} - \frac{\beta}{4} \omega. \end{cases} \quad (7)$$

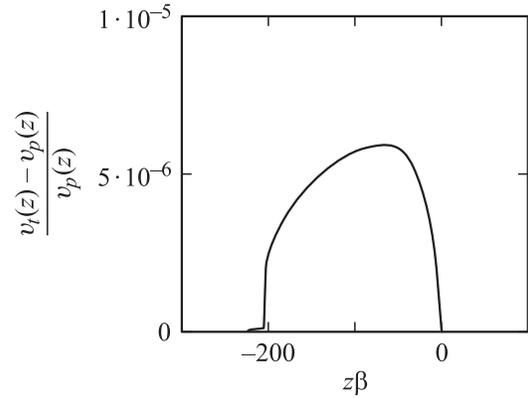


Рис. 1. Относительная ошибка между решениями уравнения третьего (4) и второго порядка (9) при значениях энергии активации $E = 1.10^5$ J/mole.

Для решения системы уравнения (7) (для неизвестных функций $\bar{v}(z)$ и $F(z)$) можно использовать метод разложения в ряд. Представим эти функции в виде разложения по параметру λ

$$\bar{v}(z) = \sum_{k=0}^N c_k \lambda^k, \quad F(z) = \sum_{k=0}^N b_k \lambda^k. \quad (8)$$

Первые коэффициенты ряда ($c_k = c_k(z)$) для $\bar{v}(z)$ удовлетворяют уравнениям

$$\frac{dc_0}{dz} = \frac{1}{\alpha c_0} \left[- (1 - c_0)(1 - c_0 - \alpha) - \frac{\alpha^2 \beta}{4} \int_z^\infty \omega(z') dz' \right], \quad (9)$$

$$\frac{dc_1}{dz} = \frac{1}{\alpha c_0} \left[\left(2 - \alpha - 2c_0 - \alpha \frac{dc_0}{dz} \right) c_1 + \frac{\alpha^2 \beta}{4} \omega \right]. \quad (10)$$

Как показывают результаты численных расчетов, уже второй член ряда (8) вносит очень малую поправку в нулевое приближение (рис. 1), что подтверждается и подстановкой решения в систему (7) или непосредственно в уравнение третьего порядка (4) для функции $\bar{v}(z)$.

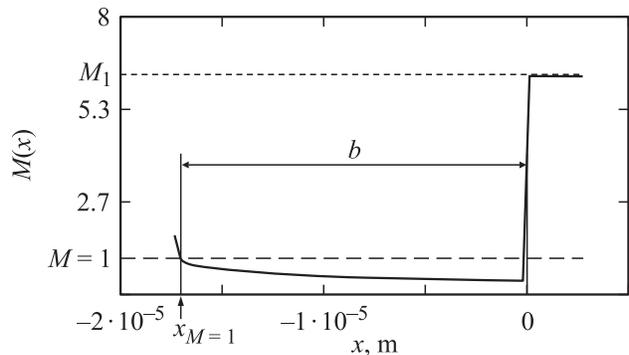


Рис. 2. Зависимость локального числа Маха от расстояния, отсчитываемого от фронта ударной волны. Показан размер области детонации b и положение плоскости Жуге $x_{M=1}$.

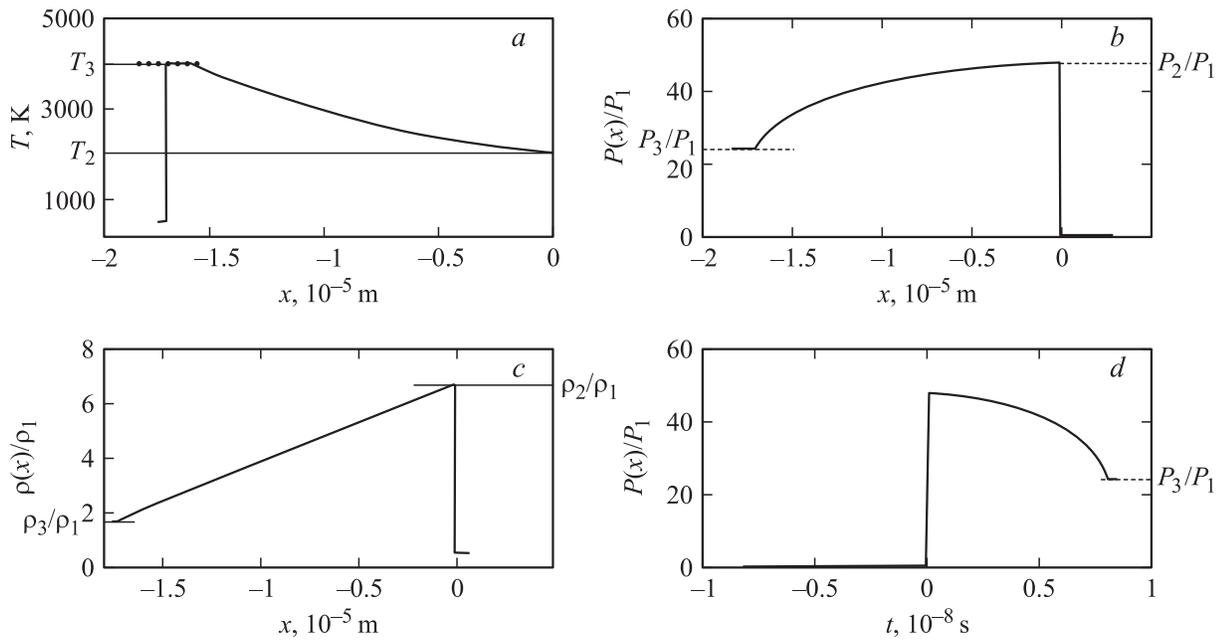


Рис. 3. Зависимость от расстояния температуры (а), отношения текущего и начального давлений (б), отношения плотности и зависимость отношения давлений от времени.

Решение уравнения (9) удобно начинать от точки максимума функции $c_0(z)$ (эта функция является нулевым приближением для функции $\bar{v}(z)$). В точке максимума z_{\max} выполняется граничное условие

$$\left. \frac{d\bar{v}(z)}{dz} \right|_{z=z_{\max}} = 0, \quad (11)$$

а величина функции $c_0(z_{\max})$ подбирается из условия

$$\bar{v}(z) \Big|_{z \rightarrow +\infty} = 1. \quad (12)$$

Затем с использованием полученной функции $c_0(z)$ вычисляется первая поправка $c_1(z)$ и т.д. Как обычно [13], положение начала координат можно задать (в месте максимума первой производной) равенством

$$\left. \frac{d^2\bar{v}(z)}{dz^2} \right|_{z=0} = 0. \quad (13)$$

Результаты расчетов для характерных значений входных параметров представлены на рис. 2–8. Для расчета использованы традиционные формулы, взятые из работы [7]. Поступающая в единицу объема мощность Q_0 есть среднее число столкновений (константа скорости K), умноженное на энергию, выделяющуюся при столкновении одной молекулы горючего с окислителем

$$Q_0 = K \frac{m_{\text{CnHm}}}{N_A} \Delta H, \quad (14)$$

где

$$K = \pi (d_{12} 10^{-10})^2 n_{\text{CnHm}} n_{\text{oxid}} \sqrt{\frac{8R_u T_1}{\pi \mu_s}} q, \quad (15)$$

константа скорости реакции, m_{CnHm} — молекулярный вес топлива (углеводорода), m_0 — молекулярный вес

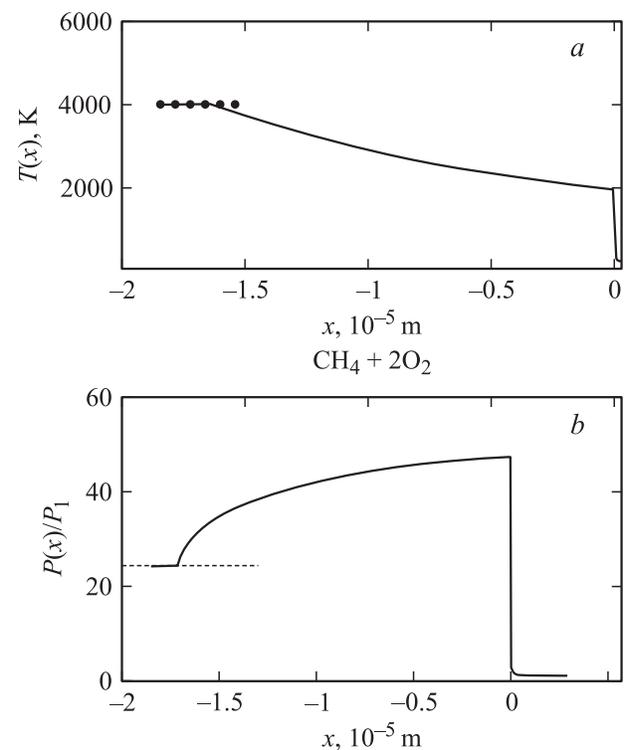


Рис. 4. Зависимость температуры и давления от расстояния при детонации в стехиометрической смеси метан–кислород. Пунктир на рис. 4, а — экспериментальное значение температуры продуктов сгорания за область существования детонации, на рис. 4, б — экспериментальное значение давления [6].

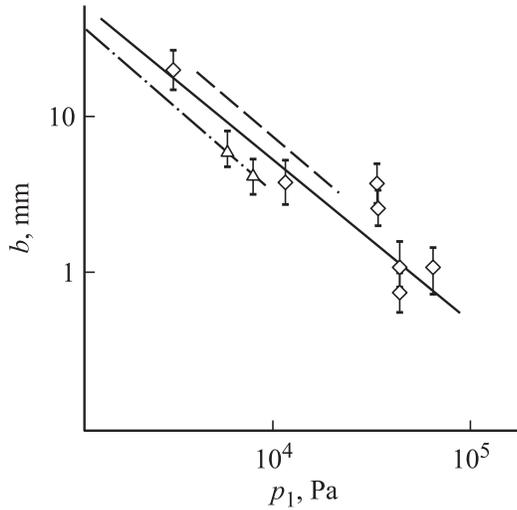


Рис. 5. Зависимость размера b детонационной волны ($2\text{H}_2 + \text{O}_2$) от давления в исходной смеси P_1 . Сплошная линия — расчет по формулам (9)–(11) и (26). Экспериментальные результаты: треугольники — работа [9], пунктир — [10], точки — [11], штрих-пунктир — [12].

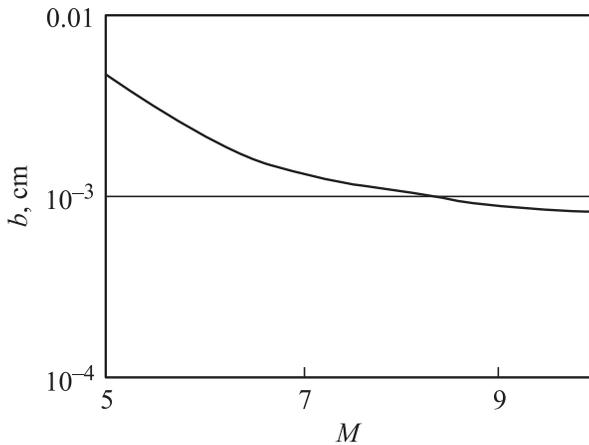


Рис. 6. Зависимость размера b детонационной волны от числа Маха.

окислителя (кислорода или воздуха), N_A — число Авогадро, ΔH — теплота сгорания топлива, $d_{12} = \frac{d_1 + d_2}{2}$ — средний диаметр молекул топлива и окислителя, выраженный в ангстремах, $n_{\text{CnHm}} = \frac{\nu_{12}}{1 + \nu_{12}} n_0$ — начальная концентрация топлива, $n_{\text{oxid}} = \frac{1}{1 + \nu_{12}} n_0$ — концентрация окислителя, ν_{12} — отношение концентрации топлива к концентрации окислителя, $n_0 = \frac{P_1}{kT_1}$ — суммарная концентрация топливной смеси, R_u — универсальная газовая постоянная, $m_s = \frac{m_{\text{CnHm}} m_0}{m_{\text{CnHm}} + m_0}$ — средняя молекулярная масса, $q \leq 1$ — множитель порядка единицы. Индексами „1“ отмечаются величины, относящиеся к невозмущенному состоянию (на $+\infty$), индекс „2“ соответствует величинам в районе фронта ударной волны, индекс „3“ отмечает обозначения величин на плоскости Жуге.

Полученные решения $\bar{v}(z)$ позволяют определить распределение по оси z всех параметров ударной волны [13]: температуры

$$T(z) = T_1 \left\{ \bar{v}(z) \left(1 + \gamma M^2 (1 - \bar{v}(z)) - \alpha M^2 \frac{\gamma + 1}{2} \frac{d\bar{v}(z)}{dz} \right) \right\}, \quad (16)$$

— давления

$$P(z) = P_1 \left[1 + \gamma M^2 (1 - \bar{v}(z)) - \alpha M^2 \frac{\gamma + 1}{2} \frac{d\bar{v}(z)}{dz} \right], \quad (17)$$

— плотности

$$\rho(z) = \frac{\rho_1}{\bar{v}(z)}, \quad (18)$$

где T_1 , P_1 и ρ_1 — температура, давление и плотность в невозмущенной области,

— скорости

$$v(z) = v_1 \bar{v}(z), \quad (19)$$

— локального числа Маха

$$M(z) = \frac{\bar{v}(z)}{\sqrt{\frac{\gamma-1}{2} (1 - \bar{v}(z)^2) + \frac{1}{M^2} + \alpha^2 \beta \frac{\gamma+1}{8} \int_z^\infty \omega(z') dz'}}. \quad (20)$$

В точке $z_{M=1}$ вычисленные внутри области детонации значения температуры $T(z_{M=1})$, (16), давления $P(z_{M=1})$ (17) и плотности $\rho(z_{M=1})$ (18) (рис. 3) равны соответствующим величинам, вычисляемым на

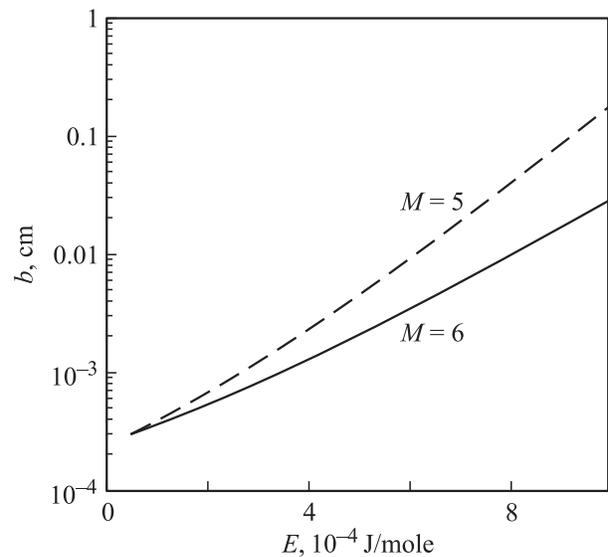


Рис. 7. Зависимость размера b детонационной волны от энергии активации топлива при двух значениях числа Маха (скорости) детонационной волны.

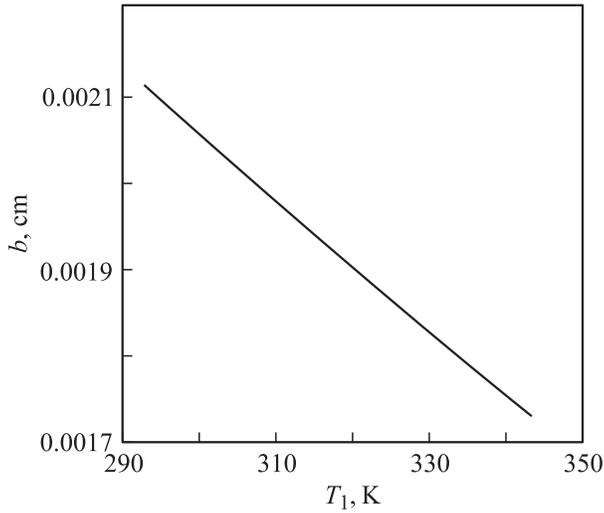


Рис. 8. Зависимость размера b детонационной волны от температуры исходной топливной смеси.

основе законов сохранения [7]:

$$\rho_3 = \frac{\rho_1}{1 + \frac{(\gamma-1)\Delta H \rho_1}{\gamma P_1} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{2\gamma P_1}{(\gamma^2-1)\Delta H \rho_1}} \right]}, \quad (21)$$

$$P_3 = P_1 \frac{\frac{\gamma+1}{\gamma-1} + \frac{2\Delta H \rho_1}{P_1} - \frac{\rho_1}{\rho_3}}{\frac{\gamma+1}{\gamma-1} \frac{\rho_1}{\rho_3} - 1}, \quad (22)$$

$$T_3 = \frac{P_3}{\rho_3 R}, \quad (23)$$

где R — газовая постоянная продуктов сгорания.

Максимальные значения плотности и давления и соответствующей температуры можно оценить, используя полученные на основе законов сохранения [13] значения плотности, давления и температуры в окрестности точки $z = 0$

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \left[\frac{(\gamma+1) \frac{P_2}{P_1} + \gamma - 1}{(\gamma-1) \frac{P_2}{P_1} + \gamma + 1 + \frac{\beta}{\gamma M}} \right],$$

$$\frac{P_2}{P_1} = \left[1 + \chi_0 \left(1 + \sqrt{1 - \frac{\beta M}{\chi^2}} \right) \right],$$

$$T_2 = \frac{P_2}{\rho_2 R}, \quad \left(\chi_0 = \gamma \frac{M^2 - 1}{\gamma + 1} \right). \quad (24)$$

Результаты расчетов

Результаты численных расчетов позволяют сделать следующие заключения. Наши результаты хорошо совпадают (с погрешностью не более 5%) с известными экспериментальными данными (рис. 4, 5). Значительный рост давления и температуры вызывает только увеличение скорости (числа Маха) детонации. При этом уменьшается область существования детонации (рис. 6).

Увеличение энергии активации увеличивает область детонации (рис. 7), но не влияет на давление и почти не снижает температуру. Аналогичным образом влияет и увеличение теплоты сгорания (при фиксированном числе Маха) — область детонации растет, температура и давление постоянны (следует помнить, что увеличение теплоты сгорания ведет к росту числа Маха). Повышение начальной температуры топливной смеси ведет к уменьшению размера области детонации (рис. 8), т.е. к ускорению сгорания топливной смеси.

В уравнения (3)–(10) не входят параметры, зависящие от давления. Энергетический безразмерный параметр β (5) в знаменателе содержит плотность в квадрате ρ_1^2 , которая пропорциональна квадрату давления, а в числителе β стоит Q_0 (мощность, выделяемая при горении топлива в единице объема, формулы (5), (14), (15)), которая пропорциональна квадрату концентрации, т.е. квадрату давления. Таким образом, параметр β от давления не зависит, а параметр λ зависит только от заданного числа Маха. Следовательно, полученное в безразмерных координатах z решение (7)–(10) не зависит от давления. Эта зависимость появляется только при пересчете к реальным расстояниям Δx (при фиксированном времени t) (2):

$$\Delta x = \frac{4\mu\gamma M}{3\rho_1 a_1 (M^2 - 1)} \Delta z$$

$$= \frac{4\mu\gamma M (1 + \nu_{12}) R_u T_1}{3a_1 (\nu_{12} m_{CnHm} + m_0) (M^2 - 1) P_1} \Delta z. \quad (25)$$

Не зависит от давления и безразмерная координата $z_{M=1}$, в которой локальное число Маха за область детонации становится равным единице $M(z_{M=1}) = 1$. Величина $z_{M=1}$ получается из этого условия по формуле (20), а реальный размер области детонации b вычисляется затем по (25)

$$b = \frac{4\mu\gamma M (1 + \nu_{12}) R_u T_1}{3a_1 (\nu_{12} m_{CnHm} + m_0) (M^2 - 1) P_1} |z_{m=1}|. \quad (26)$$

Таким образом, области детонации убывают с ростом давления P_1 по закону $1/P_1$.

Заключение

В работе рассчитаны параметры, описывающие структуру ударной волны внутри области детонации (т.е. между фронтом ударной волны и плоскостью Жуге). Определена зависимость размеров области детонации от параметров топливной смеси. Даны значения давления, плотности и температуры в окрестности фронта ударной волны. Показано, что размер области детонации обратно пропорционален давлению в исходной смеси. Сопоставление с известными экспериментальными данными позволяет считать, что в ряде случаев одномерное приближение может быть достаточно правильным при описании структуры детонационной волны.

Список литературы

- [1] *Андреев С.Г., Бабкин А.В., Баум Ф.А.* и др. Физика взрыва. М., 2006. Т. 1. 824 с. Т. 2. 650 с.
- [2] *Войцеховский Б.В., Митрофанов В.В., Топчян М.Е.* Структура фронта детонации в газах. Новосибирск, 1963. 168 с.
- [3] *Денисов Ю.Н.* Газодинамика детонационных структур. М., 1989. 176 с.
- [4] *Щелкин К.И., Трошин Я.К.* Газодинамика горения. М., 1963. 256 с.
- [5] *Фикетт У.* Введение в теорию детонации. М., 1989. 216 с.
- [6] *Хитрин Л.Н.* Физика горения и взрыва. М., 1957.
- [7] *Щетинков Е.С.* Физика горения газов. М., 1965.
- [8] *Герасимов Н.А., Кучинский В.В., Сухомлинов В.С., Сухомлинов С.В.* // ЖТФ. 2007. Т. 77. Вып. 7. С. 11–17.
- [9] *Chesik J., Kistiakowsky G.* // J. Chem. Phys. 1958, Vol. 28. P. 956.
- [10] *Just T.* Dissertation. Univ. of Gottingen, 1959.
- [11] *Opel G., Thesis M.S.* Massach. Int. of Techn., 1959.
- [12] *Kistiakowsky G., Kydd P.* // J. Chem. Phys. 1954. Vol. 22. P. 1940.
- [13] *Голятин В.Ю., Кучинский В.В., Сухомлинов В.С.* // ЖТФ. 2005. Т. 75. Вып. 4. С. 25–30.