

ДИНАМИКА ОДИНОЧНОГО ПУЗЫРЬКА С ХИМИЧЕСКИ АКТИВНЫМ ГАЗОМ

А. А. Васильев, В. К. Кедринский, С. П. Таратута

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск

Показано, что в процессе адиабатического сжатия газа в связи с увеличением относительного числа элементарных ячеек (характерного масштаба детонационного процесса) обеспечивается возможность возникновения детонационного режима в микрообъеме пузырька. При этом из-за резкого снижения критической энергии инициирования наиболее вероятно самоинициирование газовой смеси за счет адиабатического роста температуры. Показано, что инерционные свойства жидкости приводят к сильному пересжатию продуктов протекающей мгновенно химической реакции, что можно считать одним из основных механизмов усиления волн пузырьковой детонации.

ВВЕДЕНИЕ

В пузырьковой детонации [1] формирование квазистационарной уединенной волны во многом зависит от того, как в замкнутом микрообъеме отдельного газового пузырька, схлопывающегося под действием падающей ударной волны, развивается химическая реакция, которая, как известно, характеризуется целым спектром возможных режимов ее протекания. Несмотря на это в опубликованных в течение последних десяти лет работах, посвященных формированию и взаимодействию волн пузырьковой детонации [2–5] и исследованию различных подходов к определению скорости ее распространения [6, 7], детальный анализ динамики одиночного пузырька остался, по сути, вне поля зрения. Априори предполагалось, что взрыв газовой смеси в пузырьках инициируется, если обеспечена соответствующая степень сжатия. Не обсуждался и механизм существенного усиления волн в активных пузырьковых средах.

КИНЕТИКА ДЕТОНАЦИИ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ ПУЗЫРЬКА

Напомним, что согласно современным представлениям возбуждение самоподдерживающейся (многофронтной) детонации в свободном газовом объеме требует подвода критической энергии инициирования E_* и зависит от соотношения размера зоны энерговода и характерного масштаба процесса — размера элементарной ячейки a [8]. К критическим параметрам относится и радиус формирования r_{form} ,

превышающий размер ячейки a на порядок и более.

В настоящее время из известных приближенных моделей инициирования детонации экспериментальные данные наиболее адекватно описывает модель многоточечного инициирования. Она основана на представлении о базовой роли соударений поперечных волн детонационного фронта как микроинициаторов многофронтной детонации. Энергия этих соударений E_0 оценивается с помощью модели ячейки, предложенной в [8], и учитывается при оценке E_* . В приведенных ниже расчетах для смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ использована модель бруттокинетики. При этом предполагается, что время химического превращения много меньше времени индукции. Поэтому при расчетах детонации принимается, что индукционный период завершается мгновенной химической реакцией. Период индукции τ_i для нестационарных условий определяется из интегрального равенства:

$$\int_{t_*}^{t_* + \tau_i} \frac{dt}{\bar{\tau}} = 1, \quad \tau = \frac{A}{c_f^{n_1} c_{ox}^{n_2}} \exp \frac{E_a}{RT}, \quad (1)$$

где t_* — момент достижения температуры самовоспламенения смеси; c_f и c_{ox} — концентрации топлива и окислителя соответственно; n_1 , n_2 — порядок реакции. Температура $T(t)$ смеси в пузырьке определяется по адиабате с различными значениями показателя γ до начала ($\gamma = 1,3971$) и после ($\gamma = 1,2109$) химической реакции.

Для свободного объема конкретной газовой смеси критическая энергия инициирования

p_{ad}	T_{ad}	E	p_{ch}	T_{ch}	p_*	T_d	E_*	ΔE	a
0,1	298,15	$4,3 \cdot 10^{-3}$	0,96	3504,1	18,79	3681,6	5,946	0,0	1,594
0,41	478	$6,9 \cdot 10^{-3}$	2,57	3694,4	12,09	3888,7	0,2001	0,0026	0,375
1,827	681	$9,9 \cdot 10^{-3}$	8,5	3943,7	8,82	4160,9	0,00651	0,0056	0,0822
9,994	1104	$1,6 \cdot 10^{-2}$	30,9	4278,9	5,68	4522	$9 \cdot 10^{-5}$	0,0117	0,0126
33,37	1555	$2,2 \cdot 10^{-2}$	78,8	4582,1	4,18	4844,4	$4,1 \cdot 10^{-6}$	0,0177	0,00324
85,03	2028	$2,9 \cdot 10^{-2}$	164,1	4877,9	3,3	5155	$4,4 \cdot 10^{-7}$	0,0247	0,00115

Примечание. p_{ad} , T_{ad} , E — давление, температура и внутренняя энергия смеси, соответствующие ее адиабатическому сжатию; p_{ch} , T_{ch} — параметры продуктов детонации при постоянном объеме, рассчитанные по специальной программе [9]; $p_* = p_d/p_{ad}$, T_d — параметры в детонационной волне; ΔE — приращение внутренней энергии смеси в процессе сжатия пузырька. Давление приведено в МПа, энергия — в Дж, температура — в К.

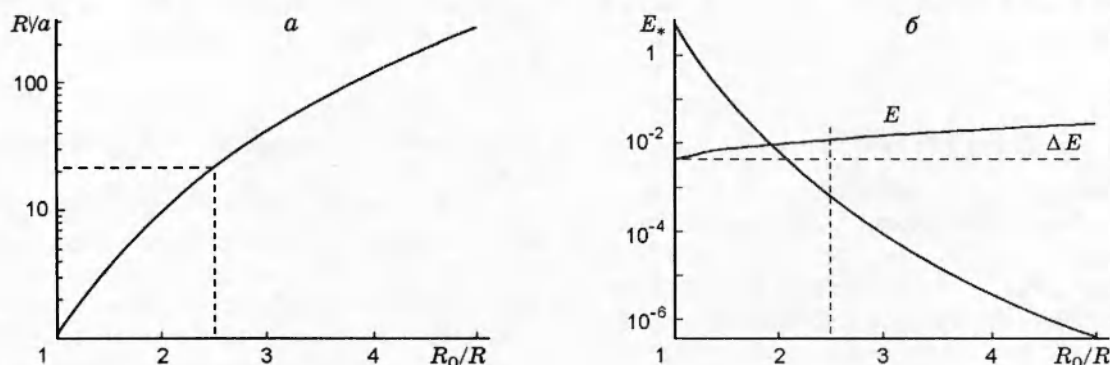


Рис. 1. Динамика «размножения ячеек» (а) и значений E_* и E (б) при адиабатическом сжатии

сферической детонации E_* и размер элементарной ячейки a определяются по данным [8, 9] и используются при расчете процессов в пузырьке. Для смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ при $p_0 = 0,1$ МПа и $T_0 = 298$ К ($A = 5,38 \cdot 10^{-5}$ мкс · моль/л, $E_a = 17,15$ ккал/моль, $n_1 = 0$, $n_2 = 1$) получаем $a = 1,6$ мм и $E_* \approx 6$ Дж. Применительно к системе с пузырьками активного газа размером 1 мм это означает, что реализовать детонационный режим в рамках указанных требований невозможно, так как радиус пузырька должен быть не меньше r_{form} . Однако при повышении давления (что собственно и реализуется при схлопывании пузырька) требования к инициированию детонации существенно меняются (см. таблицу), так как при этом $a \sim 1/p$ и $E_* \sim 1/p^2$.

Этот момент является принципиальным для пузырьковой системы, так как необходимые для детонации условия по R/a и E_* можно легко реализовать при взаимодействии системы с генерируемыми вне ее ударными волнами. Таким образом, вопрос о характере реак-

ции в пузырьках, по сути, сводится к определению динамики размера детонационной ячейки, а также природы возможного инициирования детонационного процесса. И здесь важным становится понятие самоиницирования реакции в смеси как результата изменения ее внутренней энергии под действием внешних факторов (адиабатического сжатия внешней ударной волной). На рис. 1 представлены динамика соотношения «пузырек — ячейка» (R/a) в уменьшающемся объеме пузырька R_0/R (на рис. 1, а штриховой линией отмечены данные, соответствующие моменту $t = t_*$), а также изменение критической энергии инициирования E_* , внутренней энергии E газовой смеси и ее приращения ΔE (см. рис. 1, б). Начальные условия: $R_0 = a = 1,6$ мм, $\gamma = 1,3971$, скачок давления «на бесконечности» в окружающей пузырька жидкости равен $p_\infty = 10$ МПа. Увеличение R/a и резкое уменьшение значения E_* по мере сжатия пузырька свидетельствуют о том, что если детонационный режим на начальной стадии нереален, то по мере адиабатического

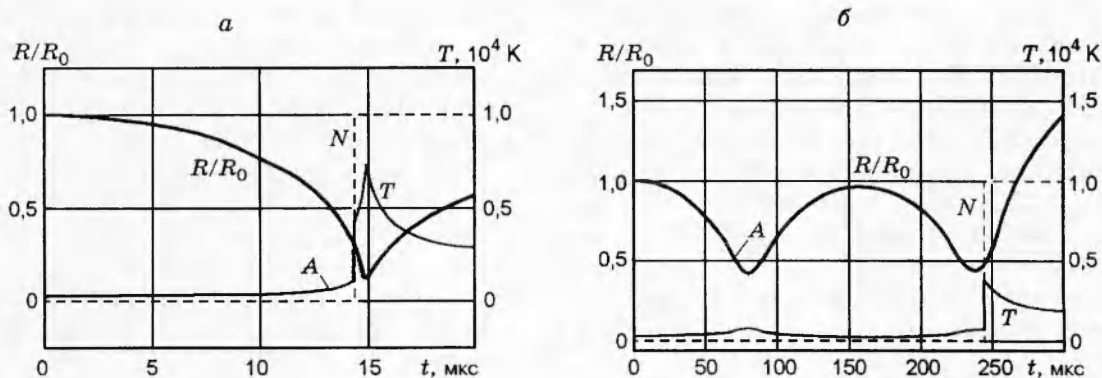


Рис. 2. Динамика пузырька:

a — взрыв на стадии сжатия, динамика температуры смеси T и доли прореагировавших молекул N ($t_* = 13,3 \text{ мкс}$); b — задержка реакции до 2-й пульсации ($t_* = 68,75 \text{ мкс}$)

сжатия газа возможность его существования не вызывает сомнений.

Более того, начиная с определенной стадии сжатия ($t = t_*$), смесь оказывается способной к самоиницированию. При уменьшении начального радиуса пузырька момент достижения благоприятных условий для инициирования сдвигается в сторону больших сжатий.

ДИНАМИКА ПУЗЫРЬКА С ХИМИЧЕСКИ АКТИВНОЙ СМЕСЬЮ

Динамика пузырька в поле мгновенно приложенного на бесконечности постоянного давления p_∞ описывается уравнением Рэлея, которое с учетом вязкости в акустическом приближении для безразмерных переменных и параметров имеет вид

$$\beta \frac{d^2\beta}{d\tau^2} + \frac{3}{2} \left(\frac{d\beta}{d\tau} \right)^2 = \beta^{-3\gamma} - \bar{p}_\infty - \frac{4}{\beta \text{Re}} \frac{d\beta}{d\tau} - 3\gamma\alpha\beta^{-3\gamma} \frac{d\beta}{d\tau}, \quad (2)$$

где $\beta = R/R_0$ — текущий радиус пузырька; $\bar{p}_\infty = p_\infty/p_0$ — внешнее давление; $\alpha = (1/c_0)\sqrt{p_0/\rho_0}$; индекс нуль присвоен начальным данным; $\tau = (t/R_0)\sqrt{p_0/\rho_0}$; ρ_0, c_0 — начальные плотность и скорость звука в жидкости; $\text{Re} = (R_0/\nu)\sqrt{p_0/\rho_0}$. Последнее слагаемое в правой части (2) учитывает сжимаемость жидкости. Температура смеси в пузырьке в каждый момент определялась по формуле $pV = mRT/\mu$. При этом изменение молярной массы в результате реакции с $\mu_0 = 12$ до

$\mu_{ch} = 14,71$ после реакции рассчитывалось исходя из условия $m = \text{const}$.

Начало расчета периода индукции $t = t_*$ определялось неравенством

$$\bar{E} - 1 \geq \bar{E}_*. \quad (3)$$

Здесь \bar{E}_* , \bar{E} — энергия инициирования и внутренняя энергия соответственно, отнесенные к начальной внутренней энергии газовой смеси. Величина E_* и температура продуктов реакции вычислялись по интерполяционным формулам, аппроксимирующим данные таблицы:

$$E_* = E^0\beta^\delta,$$

$$T_{ch} = A_0 + A_1\beta^{-1} + A_2\beta^{-2} + A_3\beta^{-3},$$

где $E^0 = 6,4746 \text{ Дж}$, $\delta = 10,2385$, $A_0 = 2925,65947$, $A_1 = 667,16983$, $A_2 = -95,94769$ и $A_3 = 8,1264$.

Время индукции τ_i находилось на основании (1), реакция «запускалась» в момент $t_{ch} = t_* + \tau_i$ и протекала мгновенно. Заметим, что момент взрыва смеси меняется несущественно, если в интеграле (1) положить $t_* = 0$. Если реакция не зажигалась на первой пульсации, то интеграл (1) продолжал вычисляться на следующих пульсациях с учетом определенной ранее части периода индукции.

Как показал расчет, при достаточно высоких значениях p_∞ скачок давления в продуктах реакции в момент взрыва резко меняет величину (но не знак) скорости схлопывания пузырька: инерция окружающей пузырек жидкости оказывается значительной и не позволяет остановить процесс схлопывания. В результате происходит дожатие газа до 920 МПа при

$p_{ch} = 44$ МПа и увеличение температуры до $7,3 \cdot 10^3$ К при $T_{ch} = 4,3 \cdot 10^3$ К (рис. 2,а, $p_{\infty} = 10$ МПа, $R_0 = 1,6$ мм). Этот эффект определяет наиболее вероятный механизм существенного усиления волны при формировании самоподдерживающегося режима. Стрелка А (рис. 2) отмечает момент $t = t_*$. Анализ результатов расчета показал: потери на акустическое излучение для рассматриваемого случая уменьшают максимальную температуру «пересжатых» продуктов реакции более чем на 10 %.

На рис. 2,б показана динамика процесса для слабых волн с амплитудой $p_{\infty} = 0,52$ МПа. Видно, что реакция запускается на второй пульсации. В этом случае взрыв в пузырьке происходит в окрестности его минимального радиуса или даже на начальной стадии расширения. Этот факт может стать принципиальным, поскольку может оказаться, что интенсивности слабой ударной волны типа ступеньки с упомянутой амплитудой будет достаточно, чтобы возбудить самоподдерживающийся режим в пузырьковой системе.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 96-02-19369).

ЛИТЕРАТУРА

1. Сычев А. И., Пинаев А. В. Самоподдерживающаяся детонация в жидкостях с пузырьками активного газа // Прикл. механика и техн. физика. 1986. № 1. С. 133–138.
2. Kedrinskii V. K., Mader Ch. Accidental detonation in bubbly liquids // Proc. 16th Intern. Symp. on Shock Tube and Waves / H. Groenig (Ed.). 1987. P. 371–376.
3. Kedrinskii V. K., Zamarayev F. N. Wave amplification in chemically active bubble media (plenary lecture) // Proc. of 17th Intern. Symp. on Shock Tubes and Waves / W. Yong (Ed.). Lehigh Univ., USA, 1989. P. 51–62.
4. Троцюк А. В., Фомин П. А. Модель пузырьковой детонации // Физика горения и взрыва. 1992. Т. 28, № 4. С. 129–136.
5. Кедринский В. К., Вшивков В. А., Дудникова Г. И., Шокин Ю. И. Взаимодействие волн в химически активных пузырьковых средах // Докл. РАН. 1996. Т. 349, № 2. С. 185–188.
6. Шагапов В. Ш., Вахитова Н. К. Волны в пузырьковой жидкости при наличии химических реакций в газовой среде // Тр. XI Междунар. симпоз. по нелинейной акустике / Под ред. В. К. Кедринского. Новосибирск: ГПНТБ СО АН СССР, 1987. С. 56–58.
7. Ляпидевский В. Ю. О скорости пузырьковой детонации // Физика горения и взрыва. 1990. Т. 26, № 4. С. 138–140.
8. Vasil'ev A. A., Nikolaev Ju. A. Closed theoretical model of a detonation cell // Acta Astronaut. 1978. V. 5. P. 983–996.
9. Васильев А. А., Валишев А. И., Васильев В. А. и др. Параметры детонационных волн при повышенных давлениях и температурах // Хим. физика. 1997. Т. 16, № 9. С. 113–117.

Поступила в редакцию 24/IX 1997 г.