

УДК 534.222.2+662.215.1

О ПРЕДЕЛАХ ДЕТОНАЦИИ В ГАЗАХ

Ю. А. Николаев, О. А. Гапонов

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

Построена одномерная модель многофронтной детонации, учитывающая трение, теплоотвод и затухание пульсаций скорости газа. Численно показано существование пределов детонации в узких каналах. Результаты расчетов находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными.

Представления о концентрационных и геометрических пределах детонации до сих пор не устоялись. Последовательно предельными считались спиновый [1], галопирующий [2] и низкоскоростной [3] режимы детонации. Попытка теоретически объяснить существование пределов детонации для волн с плоским фронтом предпринята в [4]. Справедливо отметив, что теплоотвод и трение вносят приблизительно равные вклады в дефицит скорости детонации, авторы [4] ограничились рассмотрением только теплотерь и предположили экспоненциальную зависимость скорости химического тепловыделения от температуры. Из условия роста температуры за фронтом ударной волны (УВ) в [4] получено ограничение на мощность теплоотвода и дана оценка длины зоны реакции, экспоненциально зависящей от температуры за фронтом УВ¹. Далее в пренебрежении недогоранием получено алгебраическое уравнение для дефицита скорости детонации, решение которого в координатах скорость детонации — диаметр канала носит подковообразный характер: при каждом значении диаметра может быть два, одно решение или не существовать ни одного. Из анализа соотношения мощностей теплоотвода и тепловыделения сделан вывод о неустойчивости низкоскоростного режима.

Если же не пренебрегать трением, то на фронте ударной волны при постановке задачи [4] получим:

$$C_p \frac{dT}{dx} = \frac{c^2 - \gamma(D-w)^2}{c^2 - (D-w)^2} \frac{Qd(1-\beta)}{dx} + \frac{\Pi v_0}{\Phi D} \frac{c^2 - \gamma(D-w)^2}{c^2 - (D-w)^2} \times$$

$$\times \left\{ \tau \left[D + \frac{\gamma(D-w)^3}{c^2 - \gamma(D-w)^2} \right] - q \right\} = \frac{c^2 - \gamma(D-w)^2}{c^2 - (D-w)^2} \frac{Qd(1-\beta)}{dx} +$$

$$+ \frac{\lambda \Pi w^2}{64 \Phi D [c^2 - (D-w)^2]} [4wc_0^2 + 7\gamma D(D-w)^2 + \gamma D(3w-D)^2].$$

Здесь и далее приняты обозначения: x — координата; l — расстояние до плоскости Чепмена — Жуге; h — ширина канала (щели); Π , Φ — периметр и площадь поперечного сечения канала; z — протяженность пе-

¹При этом в [4] допущена математическая некорректность: логарифм положительного, но близкого к нулю, аргумента заменен на линейную функцию. Нетрудно убедиться, что полученному с использованием этого упрощения решению в предельной точке соответствует существенно отрицательное значение аргумента логарифма. Однако это не влияет качественно на результат: решение уравнения для дефицита скорости детонации без замены логарифма находится также просто и имеет те же особенности.

риода индукции; p — давление; ρ — плотность; $v = 1/\rho$; T — температура; R — газовая постоянная; μ — молекулярная масса; u — скорость газа; D — скорость детонации; $w = D - u$; c — «турбулентная замороженная» скорость звука; M — число Маха; γ — местный показатель «замороженной» адиабаты; ε — средний квадрат пульсационной скорости; U и I — полные внутренняя энергия и энтальпия; Q — тепловой эффект реакции; C_p — теплоемкость; β — степень недогорания; τ и q — удельные сила трения и тепловой поток в стенку канала; τ_i — период индукции при фиксированных p и T ; μ_{O_2} , μ_{H_2} , $\mu_{max} = 1,5\mu_0$, $\mu_{min} = 0,5\mu_0$, $\mu_a = \mu_{min}$ — молекулярные массы кислорода, водорода, смеси в рекомбинированном, диссоциированном и атомарном состояниях соответственно; $\Theta = 4000$ К — средняя характеристическая температура возбуждения колебательных степеней свободы молекул; $E_a = 7,6 \cdot 10^4$ Дж/кмоль — эффективная энергия активации; $E = 4,592 \cdot 10^8$ Дж/кмоль — энергия диссоциации; $K_+ = 6 \cdot 10^8$ м⁶/(кмоль²·с), $A = 5,119$ м³/(кмоль·с·К^{3/4}) — кинетические константы; a — размер ячейки; $a_\infty = 1,5$ мм — размер ячейки для широких труб; $\lambda = 0,07$ — коэффициент сопротивления; λ_1 и λ_2 — собственные значения; m — показатель зависимости интенсивности турбулентности от плотности; D_∞ — скорость идеальной детонации. Индексы: 0 — параметры перед волной, * — в плоскости Чепмена — Жуге, s — на фронте УВ.

Из положительности выражения в квадратных скобках следует, что влияние трения противоположно влиянию теплоотдачи и всегда преобладает. Температура газа за ударной волной растет даже при отсутствии химического тепловыделения. Этот факт требует дополнительного анализа проблемы. Заметим, что численное решение [5, 6] подтверждает наличие пределов детонации и правильность оценки величины дефицита скорости.

Если ввести в рассмотрение зону индукции и полагать, например, что расстояние до звуковой поверхности пропорционально ее протяженности, то результатом были бы экспоненциальная зависимость зоны реакции от температуры и, далее по [4], наличие пределов детонации с дефицитом скорости порядка $RT_s/2E_a$. Однако в [7] показано, что для плоской модели детонации, учитывающей трение и теплоотвод, расстояние до звуковой поверхности, по крайней мере для широких труб, пропорционально их диаметру, существенно превышает протяженность зоны индукции и практически от нее не зависит. В то же время этот результат явно противоречит эксперименту.

Попытки авторов [8–10] экспериментально определить расстояние до поверхности Чепмена — Жуге не увенчались успехом. Согласно анализу [11], достоверна лишь оценка сверху: звуковая поверхность отстоит от фронта УВ не далее нескольких размеров ячеек многофронтной детонации.

Для спиновой, галолирующей и низкоскоростной детонации звуковая поверхность имеет существенно неплоскую или нестационарную форму. Тем не менее одномерные уравнения для осредненных по сечению и времени параметров могут иметь стационарные решения в системе координат, связанной с фронтом детонации. При этом характеристика, на которой осредненная скорость газа равна скорости распространения слабого разрыва, является аналогом плоскости Чепмена — Жуге для идеализированной стационарной детонации с плоским движением газа. Так и будем ее называть.

В [11] построена одномерная модель, дополнительно учитывающая пульсации скорости газа, связанные с ячеистой структурой фронта детонации. Получено, что расстояние до плоскости Чепмена — Жуге меньше размера ячейки и при уменьшении размера канала наблюдается резкое

уменьшение скорости детонации.

В данной работе модель [11] уточнена для узких каналов и показано существование пределов детонации.

Постановка задачи. Канал, в котором по смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ распространяется многофронтная детонация, предполагается плоским — шель шириной h . В этом случае имеет смысл говорить о многофронтной структуре даже при $h \ll a$.

Осредненное движение описывается, как и в [11], уравнениями

$$\rho u = \rho_0 D, \quad \frac{d}{dx}(p + \rho u^2 + \rho \varepsilon) = 2\tau/h,$$

$$\frac{d}{dx}(I + u^2/2 + 5\varepsilon/2) = 2(\tau D - q)/\rho_0 D h,$$

$$u \rho^m \frac{d}{dx} \left(\frac{\varepsilon}{\rho^m} \right) = \frac{\pi \rho_s \varepsilon_s^{3/2}}{\rho_0 a} \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_s} \right)^{0,24},$$

при $x < z$ $\mu \equiv \mu_0$, а при $x > z$

$$\frac{d\mu}{dx} = \frac{\rho}{u} \left[4K + \frac{\rho}{\mu} \left(1 - \frac{\mu}{\mu_{\max}} \right)^2 - AT^{3/4} \left(1 - e^{-\Theta/T} \right)^{3/2} \left(\frac{\mu}{\mu_{\min}} - 1 \right) \cdot e^{-E/RT} \right],$$

$$\int_0^z \frac{dx}{u\tau_i} = 1, \quad \frac{p}{\rho} = \frac{RT}{\mu}, \quad M = \frac{u}{c}, \quad I = U + \frac{p}{\rho},$$

$$U = \left[\frac{3}{4} \left(\frac{\mu}{\mu_a} + 1 \right) + \frac{3}{2} \left(\frac{\mu}{\mu_a} - 1 \right) \frac{\Theta/T}{e^{\Theta/T} - 1} \right] \frac{RT}{\mu} + E \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_a} \right), \quad \tau = \frac{\lambda \rho (D - u)^2}{8},$$

$$q = \frac{\lambda}{5} \rho (D - u) [I(T, \mu) - I(T_0, \mu)], \quad c^2 = \gamma \frac{RT}{\mu} + [\gamma - m(3\gamma - 5)/2] \varepsilon,$$

$$\gamma = \left\{ 1 - \left[1 + \frac{3}{4} \left(\frac{\mu}{\mu_a} + 1 \right) + \frac{3}{2} \left(\frac{\mu}{\mu_a} - 1 \right) \left(\frac{\Theta}{T} \right)^2 \frac{e^{\Theta/T}}{(e^{\Theta/T} - 1)^2} \right]^{-1} \right\}^{-1},$$

$$\tau_i = 4.17 \cdot 10^{-11} \frac{\mu_0 (\mu_{\text{O}_2} - \mu_{\text{H}_2})}{\rho \sqrt{(\mu_{\text{O}_2} - \mu_0)(\mu_0 - \mu_{\text{H}_2})}} e^{E_a/RT} \cdot \frac{\text{с} \cdot \text{кмоль}}{\text{м}^3},$$

$$\rho_s u_s = \rho_0 D, \quad \varepsilon_s = \alpha u_s^2, \quad p_s + \rho_s u_s^2 + \rho_s \varepsilon_s = p_0 + \rho_0 D^2,$$

$$I(T_s, \mu_0) + u_s^2/2 + 5\varepsilon_s/2 = I(T_0, \mu_0) + D^2/2,$$

при $x = 0$ $p = p_s$, $\rho = \rho_s$, $\varepsilon = \varepsilon_s$, $\mu = \mu_0$.

В отличие от [11] учтем зависимость размера ячейки от параметров на УВ: $a \sim D\tau_i/T_s$ [12]. Значение коэффициента сопротивления, слабо зависящее от числа Рейнольдса Re и относительной шероховатости стенок, выбрано постоянным, характерным для околопредельных режимов. Поскольку результаты расчетов зависят от λ и h лишь в виде отношения λ/h , то при необходимости легко скорректировать λ и пропорционально h .

В связи с оценочным характером расчетов положим $\alpha = 1$. В [11] использовался термин «турбулентность», хотя речь шла о значительных по величине ($\alpha \approx 1$) пульсациях скорости. Тем не менее, самый смысл подхода Колмогорова при рассмотрении затухания локально-изотропной турбулентности и заключается в том, что крупные энергонесущие вихри

порождают на своих границах каскад более мелких (инерционный интервал в пространственно-энергетическом спектре) и через них передают свою энергию в диссипационный интервал. При этом скорость диссипации энергии зависит исключительно от энергии и размеров крупных вихрей. Инерционный интервал из-за его мелкомасштабности в основном формируется быстрее затухания порождающего вихря, что и объясняет малость отклонений от автомодельности (см., например, [13]).

В рассматриваемом случае, крупные вихри, дойдя до плоскости Чепмена — Жуге, теряют более половины своей энергии. Следовательно, аналогия с затуханием локально-изотропной турбулентности с соответствующими энергией и масштабом оправдана. Тем более, что двукратная вариация темпа диссипации не вносит в результаты расчетов качественных изменений [11].

Как показано в [11], для отдельного вихря $m = \sin^2 \varphi$, (φ — угол между осями вихря и трубы), и осреднением по φ для изотропной турбулентности получено $m = 0,5$. Это же значение использовано в [7]. Такое осреднение неверно, так как величины плоских углов φ не равновероятны. Для изотропной турбулентности вероятность $\varphi < \psi$ пропорциональна стереоуглу конуса с плоским углом 2ψ при вершине. Тогда $m = 2/3$, что предполагалось в [14] для упрощения осредненных уравнений. Для узких плоских каналов все энергонесущие вихри, связанные с многофронтной структурой, имеют $\varphi = \pi/2$, чему соответствует $m = 1$. Это выяснено в последний момент, и в расчетах использовано значение $m = 0,5$, что, надеюсь, не привело к качественным ошибкам.

Задачу решали методами, использованными в [11]: интегрирование проводили методом Рунге — Кутты четвертого порядка, шаг измельчался до получения надежных результатов, скорость детонации выбирали методом «стрельбы» (достаточным считалось достижение на «пересжатых» интегральных кривых $M = 0,999$). Особое внимание уделяли точности расчета z (подынтегральная функция аппроксимировалась экспонентой, величина последнего перед окончанием периода индукции шага специально подбиралась).

Расстояние l до плоскости Чепмена — Жуге и собственные значения λ_1 и λ_2 определялись из алгебраической системы трех уравнений ($i = 1, 2, 3$):

$$\left. \frac{dM}{dx} \right|_{x=x_i} = \lambda_1 + \lambda_2 - \lambda_1 \lambda_2 \frac{x_i - l}{M(x_i) - 1}.$$

При этом значения $\frac{dM}{dx}(x_i)$ и $M(x_i)$ брались на интегральных кривых в окрестности особой точки. Точность определения λ_1, λ_2, l подтверждалась независимостью результата от выбора точек x_i . Отметим, что эта система линейна относительно $\lambda_1 + \lambda_2, \lambda_1 \lambda_2, \lambda_1 \lambda_2 l$ и имеет аналитическое решение.

Результаты расчетов. Расчеты проводились для $p_0 = 1$ атм, $T_0 = 298,2$ К. Важнейший результат — подковообразная зависимость $D(h)$ (рис. 1,а), как это и предсказывалось в [4]. Расстояние до плоскости Чепмена — Жуге для высокоскоростной ветви слабо зависит от ширины канала, а для низкоскоростной резко возрастает при удалении от предела (рис. 1,б). Расчетный предельный размер канала $h_{\min} = 0,08a_\infty$ или $0,01a$, а соответствующая скорость детонации меньше идеальной на 13%. Такой дефицит скорости характерен для околопредельных режимов [15, 16] и практически совпадает с оценкой по [4].

Спиновая детонация распространяется в трубах с диаметром $a/2\pi$, а галолирующая — в 1,5 раза меньшем [2]. Близкий аналог плоского канала — труба с концентрической вставкой. Спин в таком канале распространяется при величине зазора, в 5 раз меньшей диаметра (см. например, [1]),

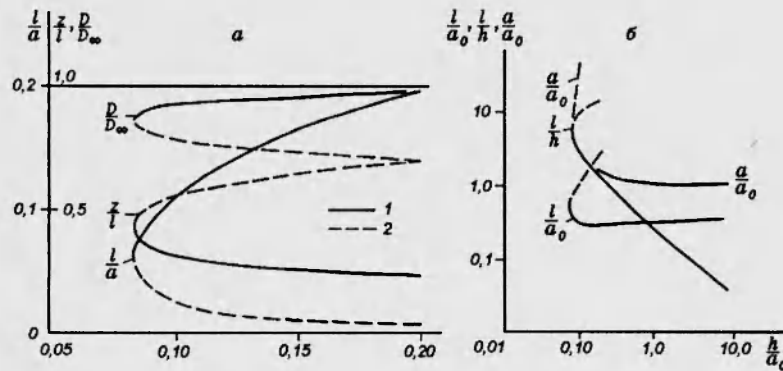


Рис. 1. Зависимости параметров детонации от ширины канала:
1 — высокоскоростная ветвь; 2 — низкоскоростная.

чему соответствует $h = 0,03a \approx 0,25a_\infty$. Следует ожидать, что галолирующая детонация может распространяться в щелях шириной $0,18a_\infty$ (естественно, этот размер зависит от шероховатости стенок канала). В [16] показано, что предельным является значение $h \approx 0,14a_\infty$. Расчетный предельный размер почти в 2 раза меньше, что для такого типа модели следует считать удовлетворительным. Отметим, что структура ячеек в плоских каналах отличается от их структуры в широких трубах, поэтому использование при расчете a экспериментального значения $a_\infty = 1,5$ мм может быть не вполне правомерным.

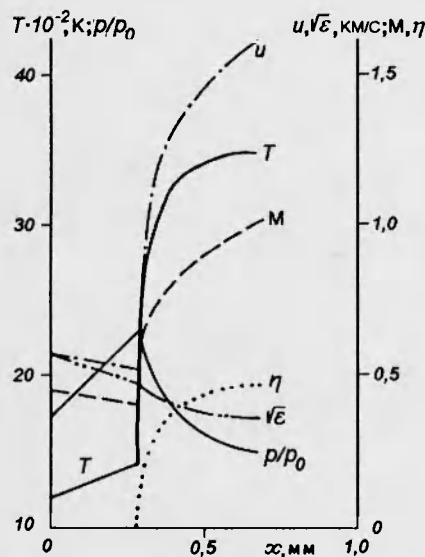


Рис. 2. Профили параметров газа в зоне реакции для предельного режима.

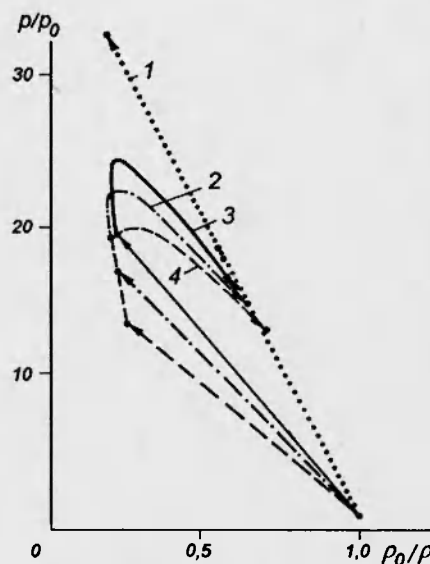


Рис. 3. Диаграмма p - v -процесса для идеальной детонации (1), $h = h_{\min}$ (2), $h = 1,2h_{\min}$ (высокоскоростная ветвь (3), низкоскоростная (4)).

Расчетное расстояние l до плоскости Чепмена — Жуке значительно меньше a , для высокоскоростной ветви протяженность зоны индукции $z < l/2$, всюду $z \ll a$, вблизи предела $l \gg h$, а размер ячейки резко возрастает. Все это не противоречит имеющимся экспериментальным данным.

На рис. 2 изображены расчетные профили основных параметров для околопредельного режима. Интересно, что температура не имеет характерного для идеальной детонации максимума при $M^2 = 1/\gamma$, до плоскости Чепмена — Жуге выделяется менее половины имеющегося запаса химической энергии ($\eta = (\mu - \mu_0)/(\mu_{\max} - \mu_0) = 0,45$), пульсации быстро расходуют около половины своей энергии и далее затухают медленно, давление имеет максимум в конце периода индукции. На $p-v$ -диаграмме (рис. 3) нет никаких неожиданностей (см. [1]).

Рассмотрим поведение интегральных кривых при фиксированном h и различных D в плоскости M, x . В многомерном фазовом пространстве интегральные кривые, естественно, не пересекаются, а их проекции на

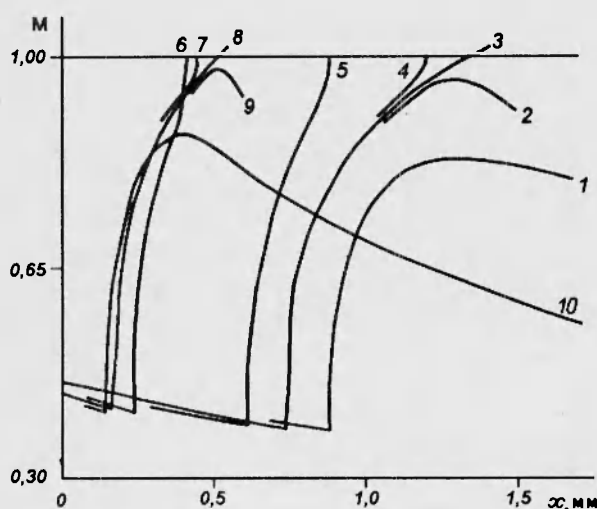


Рис. 4. Фазовый портрет при $h = 1,2h_{\min}$ (кривые пронумерованы в порядке возрастания скорости).

D , м/с: 1 — 2200, 2 — 2248, 3 — 2250 ($D_{CJ,2}$), 4 — 2253, 5 — 2300, 6 — 2550, 7 — 2633, 8 — 2636 ($D_{CJ,1}$), 9 — 2637, 10 — 2680.

плоскость M, x могут иметь пересечения. Как видно из рис. 4 при $M = 1$ имеются две особые точки (седла). Через них проходят сепаратрисы 8 и 3, соответствующие скоростям Чепмена — Жуге для высоко- ($D_{CJ,1}$) и низкоскоростного ($D_{CJ,2}$) режимов. Все интегральные кривые с $D_{CJ,2} < D < D_{CJ,1}$ имеют при $M = 1$ градиентный кризис, а при всех остальных скоростях — максимум при $M < 1$. Режимы с дозвуковым максимумом характеризуются доступностью фронта для волн разрежения и, следовательно, являются самотормозящимися. Ре-

жимам с градиентным кризисом соответствует в нестационарных задачах возникновение УВ, догоняющих и ускоряющих фронт детонации.

Таким образом, высокоскоростные режимы устойчивы, низкоскоростные — нет. При $D < D_{CJ,2}$ детонация затухает, при $D > D_{CJ,2}$ разгоняется до скорости $D_{CJ,1}$, если $D > D_{CJ,1}$, детонация пересжата и поэтому тормозится. При приближении к предельному значению $h = h_{\min}$ особые точки остаются седлами (собственные числа действительны, различны по знаку, близки по абсолютной величине, не стремятся к нулю²), сепаратрисы сближаются и при $h = h_{\min}$ остается лишь одна положительно наклоненная сепаратриса, все остальные интегральные кривые имеют максимум $M < 1$. Этот предельный режим, очевидно, неустойчив. Если $h < h_{\min}$, ни одна интегральная кривая не достигает значения $M = 1$ и, следовательно, самоподдерживающейся детонации существовать не может.

Итак, модель в принципе описывает пределы детонации с ячеистым фронтом, а расчетные критический размер и дефицит скорости находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными.

² λ_1, λ_2 равны тангенсам углов наклона образующих седло сепаратрис, т. е. dM/dx в особой точке.

ЛИТЕРАТУРА

1. Войцеховский Б. В., Митрофанов В. В., Топчян М. Е. Структура фронта детонации в газах. Новосибирск: Изд-во СО АН СССР, 1963. С. 35-79.
2. Ульяновский В. Ю. Исследование галопирующего режима газовой детонации // Физика горения и взрыва. 1981. Т. 17, № 1. С. 118-124.
3. Манжалей В. И. Режим детонации газа в капиллярах // Физика горения и взрыва. 1992. Т. 28, № 3. С. 93-99.
4. Зельдович Я. В., Компанец А. С. Теория детонации. М.: Гостехиздат, 1955. С. 124-159.
5. Зельдович Я. Б., Гельфанд Б. Е., Каждан Я. М. и др. Распространение детонации в шероховатой трубе с учетом торможения и теплоотдачи // Физика горения и взрыва. 1987. Т. 23, № 3. С. 103-112.
6. Фролов С. М., Гельфанд Б. Е. Предельный диаметр распространения газовой детонации в трубах // Физика горения и взрыва. 1991. Т. 27, № 1. С. 118-122.
7. Николаев Ю. А. Теория детонации в широких трубах // Физика горения и взрыва. 1979. Т. 15, № 3. С. 142-149.
8. Васильев А. А., Гавриленко Т. П., Топчян М. Е. О расположении поверхности Чепмена — Жуге в многофронтной детонации в газах // Третий Всесоюз. симпоз. по горению и взрыву. Ленинград, июль 1971 г.: Тез докл. Черноголовка, 1971. С. 199-200.
9. Vasiliev A. A., Gavrilenko T. P., Topchian M. E. On the Chapmen — Jouguet's Surface in Multiheaded Gaseous Detonation // Astron. Acta. 1972. V. 17, N 4/5.
10. Васильев А. А., Гавриленко Т. П., Митрофанов В. В. и др. О положении точки перехода через звуковую скорость за фронтом детонации // Физика горения и взрыва. 1972. Т. 8, № 1. С. 98-104.
11. Николаев Ю. А., Зак Д. В. Квазиодномерная модель самоподдерживающейся многофронтной газовой детонации с учетом потерь и турбулентности // Физика горения и взрыва. 1989. Т. 25, № 2. С. 103-112.
12. Васильев А. А., Николаев Ю. А. Модель ячейки многофронтной газовой детонации // Физика горения и взрыва. 1976. Т. 12, № 5. С. 744-754.
13. Монин А. С., Яглом А. М. Статистическая гидромеханика. М.: Наука, 1967. Ч. 2.
14. Трофимов В. С., Дремин А. Н. К обоснованию правила отбора для скорости детонации // Физика горения и взрыва. 1966. Т. 2, № 3. С. 19-30.
15. Васильев А. А. Околопредельные режимы газовой детонации // Физика горения и взрыва. 1987. Т. 23, № 3. С. 122.
16. Васильев А. А. О геометрических пределах распространения газовой детонации // Физика горения и взрыва. 1982. Т. 18, № 2. С. 132-136.

Поступила в редакцию 29/III 1994 г.,
в окончательном варианте — 14/XI 1994 г.