

**О ДЕФОРМАЦИИ КАПЕЛЬ В ЗОНЕ РЕАКЦИИ
ПРИ ГЕТЕРОГЕННОЙ ДЕТОНАЦИИ**

*А. А. Борисов, Б. Е. Гельфанд, С. А. Губин, С. М. Когарко,
А. Л. Подгребенков*

(Москва)

Развитие теоретических представлений о гетерогенной детонации горючих смесей, состоящих из жидких капель горючего и газообразного окислителя, находится еще в таком состоянии, которое далеко от уровня подобных работ в области газовой детонации. Вильямс [1, 2], по-видимому, впервые исследовал структуру зоны реакции в детонационной волне, распространяющейся по двухфазной смеси. В работах [1, 2] обоснована применимость модели Зельдовича — Неймана — Деринга для случая гетерогенной детонации. Кроме того, там же сделано замечание о том, что испарение жидкой фазы не может быть процессом, определяющим скорость выгорания топлива при гетерогенной детонации.

Теперь, когда выявлено, что испарение капель за фронтом детонационной волны незначительно и вносит небольшой вклад в общее тепловыделение, можно проанализировать влияние процессов дробления и деформации капель жидкости на протяженность зоны реакции при гетерогенной детонации.

1. Постановка задачи. Предположим, что по двухфазной среде, состоящей из газообразного окислителя и равномерно распределенных капель жидкого горючего, распространяется одномерная плоская детонационная волна со скоростью D . Скорость, давление, плотность и температура газа перед фронтом волны соответственно равны u_0, p_0, ρ_0, T_0 , а в любой точке за фронтом — u, p, ρ, T . Состояние жидкой фазы перед детонационной волной характеризуется скоростью капель w_0 , размером капель r_0 и массовой концентрацией жидкости в единице объема газа σ_0 . Величина σ_0 определяется соотношением $\sigma_0 = 1.33\pi r_0^3 n_0 d$ (n_0 — число капель в единице объема, d — плотность жидкости). Состояние жидкости за детонационным фронтом описывается скоростью капель w , объемом отдельной капли V и концентрацией жидкости, которая в этой области ввиду несферичности капель определяется как $\sigma = Vnd$. Движение двухфазной смеси рассматривается в системе координат, связанной с фронтом волны, вследствие чего $D = u_0 = w_0$. Рассмотрим основные упрощающие предположения.

Обычно при анализе двухфазных течений и детонационных волн используются предположения [1, 2].

1. Структура детонационной волны соответствует гипотезе Зельдовича — Неймана — Деринга о самоподдерживающейся стационарной ударной волне с последующей зоной дефлаграции.

2. Объем, занимаемой каплями жидкости, пренебрежимо мал по сравнению с объемом газа.

3. Влияние вязкости и теплопроводности сказывается только в процессе взаимодействия фаз.

4. Капли жидкости не сливаются и не сталкиваются друг с другом.

5. Вверх по потоку от детонационного фронта размер всех капель одинаков.

6. Температура капель постоянна и не учитывается зависимость поверхностного натяжения жидкости и вязкости газа от температуры.

На основе опытов, описанных в работах [4,5], можно прийти к выводу, что капли, обдуваемые высокоскоростным потоком газа $u - w > 20$ м/сек принимают форму, близкую к форме эллипсоида вращения. Малая ось эллипсоида, являющаяся и осью вращения, направлена вдоль газового потока. Ранджер и Никольс [6] показали, что деформация капель в эллипсоид вращения наблюдается до чисел Вебера и Рейнольдса $W = 10^5$ и $R = 10^6$.

Из опытов по дроблению капель известно, что после достижения капель определенной степени деформации (назовем ее критической) наблюдается быстрый распад капли на большое число более мелких капель [3,6]. Вплоть до самого момента достижения критической стадии деформации капля сохраняет свою целостность.

Сформулируем основные предположения о деформации капель за фронтом детонационной волны:

1) капли жидкости деформируются в эллипсоиды вращения, малые оси которых параллельны направлению газового потока;

2) критическая стадия деформации достигается при отношении длины большой полуоси эллипсоида вращения a к начальному радиусу капли $a / r_0 = 3$ [6];

3) вплоть до момента времени пока $a / r_0 \leq 3$ дробление капель происходит по механизму срыва с капель поверхностного слоя жидкости [3,6];

4) до момента достижения капель критической стадии деформации остается справедливой модель гетерогенной детонации, согласно которой дробление капель по механизму срыва поверхностного слоя жидкости считается процессом, который определяет скорость выгорания жидкой фазы. Другими словами, скорость испарения микрокапель, сорванных с исходных, скорость перемешивания и химических реакций полагаются большими по сравнению со скоростью процесса дробления.

2. Основные уравнения. Уравнение неразрывности для двухфазной смеси запишем так:

$$\rho_0 u_0 + \sigma_0 w_0 = \rho u + \sigma w \quad (2.1)$$

Уравнение сохранения количества движения имеет вид

$$\rho_0 u_0^2 + \sigma_0 w_0^2 + p_0 = \rho u^2 + \sigma w^2 + p \quad (2.2)$$

Уравнение сохранения энергии записывается в виде

$$\begin{aligned} \rho_0 u_0 \left[\frac{\gamma_0 p_0}{(\gamma_0 - 1) \rho_0} + \frac{u_0^2}{2} \right] + \sigma_0 w_0 \left[c T_0 + Q + \frac{w_0^2}{2} \right] = \\ = \rho u \left[\frac{\gamma p}{(\gamma - 1) \rho} + \frac{u^2}{2} \right] + \sigma w \left[c T_0 + Q + \frac{w^2}{2} \right] \end{aligned} \quad (2.3)$$

Здесь $\gamma = c_p / c_v$ отношение удельных теплоемкостей при постоянном давлении c_p и объеме c_v , c — теплоемкость жидкости, T_0 — температура капель.

К этим уравнениям добавляется уравнение состояния газовой среды

$$Mp = \rho TR^* \quad (2.4)$$

и сохранения общего числа капель

$$nw = \text{const} \quad (2.5)$$

Здесь M — молекулярный вес газа, R^* — газовая постоянная, T — температура газа.

Если большая полуось эллипсоида имеет размер a , то уравнение движения капли будет

$$w \frac{dw}{dx} = - \frac{k\rho}{2Vd} (w - u)^2 \pi a^2 \quad (2.6)$$

Здесь x — расстояние от ударного фронта, $k = 0.27R^{0.20}$ — коэффициент сопротивления [7], $R = 2a(w - u)v^{-1}$, v — кинематическая вязкость газа.

Уравнение убыли объема капли за счет срыва с капли поверхностного слоя жидкости запишем, согласно [3], как

$$w \frac{dv}{dx} = - 4\pi \left(\frac{v}{v_f} \right)^{0.16} \left(\frac{\rho}{\rho_f} \right)^{0.33} v_f^{0.5} (w - u)^{0.5} a^{1.5} \quad (2.7)$$

Здесь v_f — кинематическая вязкость жидкости.

Теоретические представления о деформации капель рассмотрены в работах [3,8].

Преобразовав уравнение деформации капли, полученное в работе [8], к удобному виду и пренебрегая влиянием поверхностного натяжения и вязкости, получим

$$Vd \frac{d^2s}{dt^2} = 0.5 \pi a^2 \rho (w - u)^2 \quad (2.8)$$

Здесь s — перемещение поверхности капли вдоль малой оси эллипсоида, t — время.

Переходя от переменной t к переменной x , получаем

$$w^2 \frac{d^2s}{dx^2} = 0.5 \pi a^2 (Vd)^{-1} \rho \left(k \frac{ds}{dx} + 1 \right) (w - u)^2 \quad (2.9)$$

Объем эллипсоида вращения равен $V = \frac{4}{3}\pi b a^2$, поэтому для решения остается найти величину малой полуоси b .

При неизменной массе капли $b = r_0 - s$. С учетом изменения массы получаем

$$b = r (1 - sr_0^{-1}) \quad (2.10)$$

Здесь $r = 0.62V^{0.33}$ — текущее значение радиуса капли, если бы она оставалась сферической в процессе дробления.

Обозначив значения всех переменных непосредственно за ударным фронтом, ведущим детонацию, индексом 1, перейдем к безразмерным переменным

$$\begin{aligned} w' &= \frac{w}{w_0}, & u' &= \frac{u}{u_0}, & \sigma' &= \frac{\sigma}{\sigma_0}, & s' &= \frac{s}{r_0} \\ \delta' &= \frac{v^{0.33}}{r_0}, & n' &= \frac{n}{n_0}, & x' &= \frac{x}{r_0}, & p' &= \frac{p}{p_1} \\ T' &= \frac{T}{T_1}, & \rho' &= \frac{\rho}{\rho_1}, & t' &= \frac{tw_0}{r_0}, & M' &= \frac{M}{M_1} \end{aligned}$$

Опуская здесь и в дальнейшем индексы при безразмерных параметрах, получаем следующий вид уравнений (2.1) и (2.2)

$$\rho u = AB, \quad \rho p_1 = 1 + \rho_0 u_0^2 \rho_0^{-1} (C - A \rho^{-1} B^2) \quad (2.11)$$

Здесь

$$A = \rho_0 \rho_1^{-1}, \quad B = 1 + \sigma_0 \rho_0^{-1} (1 - \sigma w), \quad C = 1 + \sigma_0 \rho_0^{-1} (1 - \sigma w^2)$$

Воспользовавшись уравнениями (2.11) и (2.3), представим безразмерную плотность газа в виде

$$\rho = ABDE^{-1} [1 + (1 - BED_1^{-2})^{0.5}] \quad (2.12)$$

Здесь

$$D = [p_0 (\rho_0 u_0^2)^{-1} + C] \gamma (\gamma - 1)^{-1}, \quad D_1 = D (\gamma - 1)^{0.5} (\gamma + 1)^{-0.5}$$

$$E = \frac{2\gamma_0 p_0}{(\gamma_0 - 1) \rho_0 u_0^2} + 1 + \sigma_0 \rho_0^{-1} \left[\frac{2(cT_0 + Q)}{u_0^2} (1 - \sigma w) + 1 - \sigma w^3 \right]$$

Уравнение (2.12) можно упростить, если принять во внимание, что в детонационной волне $p_0 / \rho_0 u_0^2 \ll 1$, а в плоскости Чепмена — Жуге $\sigma = 0$ и $1 - BED_1^{-2} = 0$.

Безразмерный вид уравнений состояния и сохранения общего числа капель таков

$$Mp = \rho T, \quad F\sigma w = \delta^3 \quad (2.13)$$

причем $F = 4/3\pi$, $M \approx 1$.

Уравнения движения и убыли объема капель в безразмерной форме имеют вид

$$w \frac{dw}{dx} = -A_1 (w - u)^{2.21} (\sigma w)^{-0.26} \rho (1 - s)^{-1.1} \quad (2.14)$$

$$w \frac{d(\sigma w)}{dx} = -A_2 (w - u)^{0.5} \rho^{0.33} (\sigma w)^{0.5} (1 - s)^{-0.75} \quad (2.15)$$

После введения дополнительной переменной $ds/dx = \eta$ получаем уравнение деформации капель

$$w \frac{d\eta}{dx} = A_1 \frac{(w - u)^{2.21} \rho \eta}{(\sigma w)^{0.26} (1 - s)^{1.1}} + A_3 \frac{\rho (w - u)^2 (\sigma w)^{0.33}}{(1 - s)} \quad (2.16)$$

Коэффициенты A_1 , A_2 , A_3 определяются соотношениями

$$A_1 = 0.1 \rho_1 d^{-1} R_0^{0.21}, \quad A_2 = 4.2 (v_f v^{-1})^{0.33} (\rho_1 d^{-1})^{0.33} R_0^{-0.5}$$

$$A_3 = 0.375 \rho_1 d^{-1}, \quad R_0 = w_0 r_0 v_0^{-1}$$

Для получения более полной картины процесса те же уравнения были записаны в координатах времени t с началом отсчета на фронте детонационной волны. Эти уравнения можно вывести из записанных выше

$$\frac{dw}{dt} = -A_1 (w - u)^{2.21} \rho (\sigma w)^{-0.33} (1 - s)^{-1.1} \quad (2.17)$$

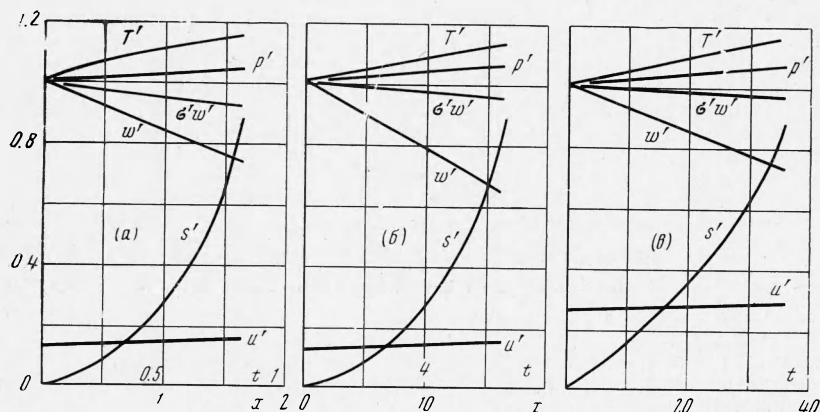
$$\frac{d(\sigma w)}{dt} = -A_2 \rho^{0.33} (w - u)^{0.5} (\sigma w)^{0.5} (1 - s)^{-0.75}$$

$$\frac{ds}{dt} = \varphi, \quad \frac{d\varphi}{dt} = A_3 \rho (w - u)^2 (\sigma w)^{-0.33} (1 - s)^{-1}$$

3. Результаты расчета и их обсуждение. Решение систем уравнений (2.14) — (2.16) и (2.17) выполнялось численно методом конечных разностей на ЭЦВМ «Мир-1». Расчет производился для двухфазной смеси, состоящей из капель гептана и газообразного кислорода. Термодинамическое расчетное значение скорости детонации при стехиометрическом составе этой смеси ($\sigma_0/\rho_0 = 0.284$) и начальном давлении и температуре смеси $p_0 = 1$ атм и $T_0 = 300^\circ$ К составляет $D = 2400$ м/сек. [9]. Рассмотрены два варианта монодисперсного распыла гептана в кислороде с размерами капель $r_0 = 0,1$ мм и $r_0 = 1$ мм. Особенность расчета состояла в контроле величины относительной деформации капли жидкости s . Из уравнения (2.9) следует, что при $a/r_0 = 3$ значение критической стадии деформации составляет $s^* = 0.9$. На основании этого расчеты прекращались при $s = s^* = 0.9$.

Результаты численного расчета параметров двухфазного потока за фронтом детонационной волны представлены на фигуре. Из графиков видно, что достижение критической стадии деформации у капель жидкости, т. е. $s = 0.9$, происходит в тот момент, когда за счет срыва поверхностного слоя жидкости успевает уменьшиться начальная масса капли на $(1 - \sigma w) \approx 0.08$ у капель радиусом $r_0 = 10^2$ мк (фигура, а)

и только на $(1 - \sigma w) \approx 0.02$ у капель с $r_0 = 10^3 \text{ мк}$ (фигура, б). В момент времени, когда $s = s^* = 0.9$ относительная скорость газа и капель велика и составляет около 10^3 м/сек . Отсутствие опытных данных о спектре размеров капель, образовавшихся при распаде исходных капель, не позволяет пока найти расчетным путем промежуток времени и расстояние, необходимые для их полного испарения, перемешивания и сгорания. Однако, приняв в грубом приближении размеры вновь образующихся микрокапель равными $2b$ (при $s = s^* = 0.9$), можно показать, что выгорание капель размером $r_0 = 10^2 \text{ мк}$ закончится за счет испарения на расстоянии $x \approx 10 \text{ мм}$ от детонационного



фронта, а капель размером $r_0 = 10^3 \text{ мк}$ — на расстоянии $x \approx 100 \text{ мм}$. По модели испарения [4] длина зоны реакции для капель с $r_0 = 10^2 \text{ мк}$ составляла $x \approx 1 \text{ м}$, а для капель с $r_0 = 10^3 \text{ мк}$ — $x \approx 6 \text{ м}$. По модели дробления, по механизму срыва поверхностного слоя жидкости с капель те же значения получаются соответственно $x \approx 60-100 \text{ мм}$ ($r_0 = 10^2 \text{ мк}$) и $x \approx 0.6-1 \text{ м}$ ($r_0 = 10^3 \text{ мк}$). Таким образом, деформация капель в зоне реакции, способствуя быстрому разрушению капель, приводит, по-видимому, к наименьшим значениям длины зоны реакции.

При гетерогенной детонации в смесях с каплями размером $r_0 = 0.1 \text{ мм}$ критическая стадия деформации, т. е. $s = s^* = 0.9$, достигается через $1 \cdot 10^{-6} \text{ сек}$ после контакта капель с фронтом волны. По-видимому, при этом образование гомогенной газовой смеси за фронтом волны происходит за времена, близкие по порядку величины к периоду индукции воспламенения таких же по составу газовых смесей после сжатия их во фронте детонационной волны. Скорость детонации в такой гетерогенной смеси не будет отличаться от скорости детонации в гомогенной газовой смеси эквивалентного состава, так как потери энергии из зоны реакции будут практически одинаковыми. Для смесей стехиометрического состава экспериментальные значения скорости детонации будут мало отличаться от расчетного значения. В работе [9] по измерению скорости детонации в горючих аэрозолях с размерами капель $r_0 \leq 0.8 \text{ мм}$ получены данные, подтверждающие совпадение расчетных величин скоростей детонации с экспериментально измеренными.

Распространение детонации в двухфазных смесях с каплями $r_0 \geq 1 \text{ мм}$ требует особого рассмотрения. Легко видеть из графиков фигуры, что при увеличении размера капель существенно увеличивается отрезок времени, необходимый для того, чтобы $s = s^*$. По-видимому, это обстоятельство вместе с рядом других, упоминаемых ниже, приводит к тому, что величина скорости детонации в подобной двухфазной смеси, как показали авторы работ [9, 10], падает до значений, составляющих лишь около 50% расчетного. В гомогенных газовых смесях подобные режимы детонации неизвестны. Уже при незначительном понижении скорости газовой детонации (на 10-15%) наблюдается распад детонационной волны. Для выяснения природы детонационных волн в гетерогенных смесях с крупными каплями проделан расчет изменения параметров двухфазной гептан-кислородной смеси стехиометрического состава с каплями $r_0 = 1.3 \text{ мм}$ за детонационной волной, имеющей скорость $D = 1200 \text{ м/сек}$. Результаты расчета приведены на фигуре, в. Достижение критической стадии деформации $s = s^* = 0.9$ совершается за время $t \approx 3.5 \cdot 10^{-5} \text{ сек}$. За то же время вследствие сдирания поверхностного слоя жидкости с капли успевает сорваться только 2% начальной массы ($1 - \sigma w = 0.02$). Сравним полученные расчетные данные с экспериментальными результатами, приведенными в работе [10], где представлена серия фотографий, которые дают представление о превращениях, претерпеваемых каплей жидкости $r_0 = 1.3 \text{ мм}$ за фронтом волны при $D = 1200 \text{ м/сек}$. Уже через промежуток времени $t = (3-6) \cdot 10^{-6} \text{ сек}$ становится заметной и прогрессирует во времени деформация капли

и срыв вторичных микрокапель. Деформация капли проявляется в росте размера ее поперечного сечения, параллельного плоскости фронта волны.

Однако вплоть до $t \approx 40 \cdot 10^{-6}$ сек фотографии дробящейся капли в нейтральной [6] и окислительной среде [10] подобны друг другу, что, по-видимому, свидетельствует о незначительном влиянии горения на развитие процесса на этой стадии. Согласно развитой в п. 2 модели и известным данным о дроблении капель [3-6] интенсивное разрушение капли начинается спустя промежуток времени $t = t(s^*) \approx 35 \cdot 10^{-6}$ сек после контакта фронта волны с каплей. Авторы работы [10] в момент времени $40 \cdot 10^{-6}$ сек $\ll t \leq 80 \cdot 10^{-6}$ сек наблюдали сильный вторичный взрыв в глубине зоны за передним фронтом. По всей вероятности причиной вторичного взрыва и является образование вследствие начавшегося интенсивного распада капли локальных очагов подготовленной к сгоранию горючей смеси и их дальнейшее быстрое выгорание, служащее источником возбуждения вторичных ударных волн. Вторичные ударные волны, образующиеся в результате выгорания очагов взрывчатой смеси, догоняют фронт исходной волны, обеспечивая передачу энергии из зоны основного тепловыделения к ударной волне. Вторичные волны, уходящие в противоположном направлении, уносят часть энергии в продукты детонации. Однако основные потери энергии, по-видимому, связаны с затянутостью во времени процесса догорания распавшейся капли. После распада капли процесс энергосыделения лимитируется скоростью процесса смешения компонентов смеси, который, судя по результатам работы [6], длится в течение времени $t = 6r_0 (v_1 - w_1)^{-1} (\rho_1^{-1} d)^{0,5}$. Следует ожидать, что существенная часть энергии, выделяющейся на этой стадии, не идет на поддержание детонационной волны, так как из-за большой длины зоны реакции велики потери энергии в стенки трубы, и выделение энергии может происходить уже за «головой» волны разрежения.

Таким образом, при детонации распылов с мелкими каплями процесс тепловыделения протекает квазигомогенно (почти как при газовой детонации). Протяженность зоны тепловыделения при этом сравнима с длиной той же зоны при газовой детонации. Вследствие указанного обстоятельства величина скорости волн гетерогенной детонации, как и волн газовой детонации, незначительно отличается от расчетного по термодинамической теории значения.

Значительное увеличение диаметров капель приводит к неоднородности распределения концентрации горючего в объеме за фронтом волны, к возникновению интенсивных вторичных ударных волн и ярко выраженной неравномерности процесса тепловыделения (а также, по-видимому, и к недогоранию). Вследствие существенных потерь энергии из зоны реакции скорость детонации в смесях с крупными каплями должна быть меньше расчетной.

Поступила 3 VII 1969

ЛИТЕРАТУРА

1. Williams F. A. Structure of detonations in dilute sprays. Phys. Fluids, 1961, vol. 4, No. 11, pp. 1434-1443.
2. Уильямс Ф. Детонация в жидких аэрозолях с малой концентрацией капель. В сб. «Детонация и двухфазное течение», М., «Мир», 1966.
3. Engel O. G. Fragmentation of waterdrops in the zone behind an air shock. J. Res. Nat. Bur. Standards, 1958, vol. 60, No 3, pp. 245-280.
4. Clark B. J. Breakup of a liquid jet in a transverse flow of gas. NASA TN D - 2424, 1964.
5. Волгин Б. П., Югай Ф. С. Экспериментальное определение коэффициента сопротивления жидкой капли в процессе деформации и дробления ее в турбулентном потоке газа. ПМТФ, 1968, № 1.
6. Ranger A. A., Nicholls J. A. Aerodynamics shattering of liquid drops. AIAA Paper, 1968, No 83.
7. Ламбрайс С., Комбс Л. Экспериментальное изучение стационарного горения в ракетной камере смеси жидкого кислорода с керосином и теория горения распыленной струи. В сб. «Детонация и двухфазное течение», М., «Мир», 1966.
8. Gordon G. D. Mechanism and speed of breakup of drops. J. Appl. Phys. 1959, vol. 30, No, 11, pp. 1759-1761.
9. Dabora E. K., Ragland K. W., Nicholls J. A. Drop size effects in spray detonations. 12-th Sympos. (Internat.) Combust., Pittsburgh, Combust. Inst., 1969, pp. 19-26.
10. Ragland K. W., Dabora E. K., Nicholls J. A. The observed structure of spray detonations. Phys. Fluids, 1968, vol. 11, No. 11, pp. 2377-2389.