

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ГАЗОВЗВЕСИ ЧАСТИЦ УГЛЯ

А. В. Фёдоров, Т. А. Хмель\*

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск; Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, 630008 Новосибирск, fedorov@ngasu.nsk.su

\*Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск, khmel@itam.nsc.ru

Развита физико-математическая модель, описывающая распространение детонационных волн в газовзвеси частиц угольной пыли в воздухе или кислороде в рамках представлений механики односкоростного двухтемпературного континуума. Модель приведена в соответствие с известными экспериментальными данными по зависимости скорости детонации от концентрации частиц, по задержкам воспламенения за ударными волнами и характерным временам процессов пиролиза и горения. Проанализированы стационарные детонационные структуры. Путем численного моделирования ударно-волнового инициирования показано формирование и устойчивое распространение волн стационарной детонации.

Ключевые слова: ударные волны, детонация, газовзвесь, частицы угольной пыли, математическое моделирование.

### ВВЕДЕНИЕ

Иницирование и распространение детонационных волн в газовзвесах угля исследовалось как экспериментально, так и теоретически. В динамических условиях (за ударными и детонационными волнами) процессы воспламенения и горения угольной пыли имеют свои особенности, отличные от горения частиц угля в условиях топочных камер [1–4]. Распространение детонационных волн в газовзвесах угля ранее считалось возможным только в условиях инициирующего воздействия волны газовой детонации на горение частицы угля (например, в метановоздушной или ацетиленовоздушной смеси). В такой постановке процесс исследовался экспериментально в [5] и в рамках математического моделирования в [6–8]. В [8] получено качественное соответствие данным [5] по скорости детонации метановоздушной взвеси угля при выходе на стационарный режим. В экспериментах [9, 10], а затем и в [11, 12] зафиксировано распространение детонационных волн в газовзвеси частиц угля в кислороде и смесях кислорода с азотом. В [11] приведены соответствующие измеренным амплитудам детонационных волн значения скорости детонации для двух фракций частиц (диаметром 25 и 54 мкм)

с различным содержанием летучих в широком диапазоне изменения начальной концентрации угля. Несмотря на значительный разброс приведенных данных, основным фактором, определяющим скорость детонации в угольной газовзвеси, по мнению авторов [11], является отношение массы летучих к массе кислорода. В [12] для фракций угля до 70 и 120 мкм, соответствующих по содержанию летучих фракции 54 мкм в [11], приведены результаты наблюдений перехода дефлаграции в детонацию, хотя зафиксированные скорости детонации оказались значительно выше, чем в [11]. Таким образом, распространение детонационных волн в угольной взвеси в воздухе и кислороде подтверждено экспериментально. В то же время остается ряд вопросов, требующих дополнительных исследований, например, влияние процессов пиролиза и горения летучих на формирование детонационной волны.

Одним из способов изучения быстропротекающих процессов, в том числе и детонационных, в настоящее время является математическое и численное моделирование, дополняющее эксперимент. Авторами [13] была разработана математическая технология создания теории гетерогенной детонации газовзвесей применительно к исследованию детонации взвеси частиц алюминия в кислороде. Технология включает в себя разработку физико-

Работа выполнена при поддержке фондов МНТЦ (код проекта 612-Б) и МО (грант Е00-4.0-90).

математической модели, основанной на принципах механики гетерогенных сред и описывающей основные физико-химические процессы; верификацию модели в соответствии с известными экспериментальными данными по зависимости скорости детонации от концентрации частиц, по задержкам воспламенения и другим характерным параметрам процесса; построение карты решений возможных стационарных режимов детонации (Чепмена — Жуге, пересжатых, недосжатых); анализ структуры и устойчивости течения; определение сценариев и критериев инициирования детонационных волн при различных условиях возбуждения.

В [14] предложена математическая модель воспламенения угольной частицы, применимая к процессам за ударными и детонационными волнами. На ее основе детально изучены различные режимы воспламенения и получено соответствие известным экспериментальным данным по задержкам воспламенения угольной частицы за отраженными ударными волнами.

В настоящей работе на базе основных подходов [13] и описания физико-химических процессов [14] развита математическая модель детонации газовзвеси угольной пыли в воздухе и кислороде. Модель основана на представлениях механики гетерогенных сред в односкоростном двухтемпературном приближении с привлечением кинетических уравнений глобальных химических реакций. Модель приведена в соответствии с данными [11] по скорости распространения стационарных волн детонации и согласована с известными экспериментальными данными по временам задержки воспламенения, выходу летучих, длительности горения частиц и другим характерным параметрам.

На основе разработанной математической модели детонационного горения смеси газа и угольных частиц проведен анализ стационарных детонационных структур. Устойчивость полученных течений исследована путем численного моделирования процесса ударно-волнового инициирования детонации в нестационарной постановке, результатом которого являются формирование стационарных волн детонации и их распространение в самоподдерживающемся режиме.

## 1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЕТОНАЦИИ ЧАСТИЦ УГЛЯ

Математическая модель детонации газовзвеси угольной пыли является обобщением пред-

ложенной в [14] модели воспламенения угольных частиц с учетом реакций пиролиза, горения летучих и коксовой составляющей на случай движущейся гетерогенной среды. В соответствии с подходом, развитым в [13], основные уравнения следуют из законов сохранения масс, импульсов и энергий каждой из фаз и включают законы химического превращения, записанные в приведенном виде. Значения обобщенных констант, характеризующих тепловыделение химических реакций, определяются из соответствия расчетных и известных экспериментальных данных по зависимости скорости распространения детонационных волн в угле-взвеси от концентрации угля и летучих [11]. Другие константы модели выбираются из условий соответствия известным экспериментальным данным по задержкам воспламенения в ударных волнах, времени горения частицы и другим характерным параметрам процессов. Приведенные ниже сравнительные оценки характерных времен процессов релаксации в среде показывают, что скоростное равновесие фаз наступает намного раньше температурного, а тепловая релаксация длится в течение периода задержки воспламенения и начальной стадии горения. Это позволяет на первом этапе ограничиться рассмотрением односкоростной двухтемпературной модели, при этом влияние обдува на характеристики пиролиза учитывается интегрально. В развитом детонационном течении мы пренебрегаем возможностью срыва пламени и погасания при обдуве частицы. Поскольку наибольшее различие температур фаз наблюдается на фронте замороженной ударной волны, а в зоне горения температуры фаз приходят в равновесие, то влияние теплообмена на параметры детонационного течения оказывается невелико. В частности, как показывает анализ, оно не приводит к появлению решений с внутренней звуковой точкой, отвечающих режимам недосжатой детонации, как, например, для газовзвеси частиц алюминия [13]. Поэтому хотя при горении частицы в окружающем ее объеме газа происходят сложные процессы, характеризующиеся поперечными течениями и отрывом пограничного слоя, влияние этих локальных течений вблизи индивидуальной частицы на скорость теплообмена не учитывается. Считается также, что внутри частицы мгновенно достигается тепловое равновесие как по объему, так и по компонентам, составляющим частицы. Принимается, что все тепло химичес-

кой реакции выделяется в газовой фазе, тепло, расходуемое на пиролиз, берется из газовой фазы, а термодинамические свойства газобразных продуктов реакции сходны со свойствами исходной газовой смеси. Рассматривается диапазон концентраций углерода (порядка стехиометрического состава), при котором можно пренебречь влиянием объема, занятого частицами, и их столкновениями между собой.

С учетом вышесказанного можно ограничиться рассмотрением четырех основных взаимодействующих компонентов. Индексом 1 будем обозначать часть газовой фазы, включающую кислород, инертные газы и продукты реакций; 12 — горючую часть летучих в газовой фазе; 2 — летучие в связанном состоянии в частице; 3 — коксовую составляющую частицы, включающую несгораемую часть (золу).

Основные уравнения, описывающие сохранение и возникновение массы компонентов газугольной смеси, в односкоростном двухтемпературном приближении в нестационарных одномерных течениях имеют вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \xi_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial \xi_{12}}{\partial x} = \frac{1}{\rho} (\xi_{12}^* w_2 - w_{12}),$$

$$\frac{\partial \xi_2}{\partial t} + u \frac{\partial \xi_2}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} w_2, \quad \frac{\partial \xi_3}{\partial t} + u \frac{\partial \xi_3}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} w_3, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (p + \rho u^2)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E u + p u)}{\partial x} = 0,$$

где  $\xi_1 = \rho_1/\rho$ ,  $\xi_2 = \rho_2/\rho$ ,  $\xi_{12} = \rho_{12}/\rho$ ,  $\xi_3 = \rho_3/\rho$  ( $\xi_1 = 1 - \xi_2 - \xi_{12} - \xi_3$ ) — массовые концентрации рассматриваемых компонентов,  $\xi_{12}^* = 0,033 + 5,94\xi_{22,0} - 11,3\xi_{22,0}^2$  — доля горючих летучих в их общей массе [14] ( $\xi_{22,0}$  — начальное содержание летучих в частице),  $\rho = \rho_1 + \rho_{12} + \rho_2 + \rho_3$ ,  $\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_{12}$  — средние плотности фаз и компонентов,  $u$  — скорость газа,  $w$  — скорость реакции,  $p$  — давление,  $E$  — полная энергия смеси. Влиянием излучения на распространение детонационной волны можно пренебречь [14]. В работе принимается температурный критерий воспламенения коксовой составляющей частицы, а процессы пиролиза и горения описываются с использованием следующих полуэмпирических соотношений [14, 15]:

$$w_2 = \frac{\rho_2}{\tau_2} \exp\left(-\frac{E_2}{RT_2}\right), \quad w_{12} = \frac{\rho_{12}}{\tau_{12}} \exp\left(-\frac{E_{12}}{RT_1}\right),$$

$$w_3 = \begin{cases} \frac{\rho_3 - \tilde{\rho}_{eq}}{\tau_3} \exp\left(-\frac{E_3}{RT_2}\right), & T_2 > T_{ign}, \\ 0, & T_2 \leq T_{ign}. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь  $T_1$  — температура газовой фазы, представляющей собой смесь газовых компонентов;  $T_2$  — температура частиц угля;  $T_{ign}$  — температура воспламенения частицы угля;  $E_{12}, E_2, E_3$  и  $\tau_{12}, \tau_2, \tau_3$  — соответственно энергии активации и характерные времена протекания реакций пиролиза, горения летучих и горения кокса;  $\tilde{\rho}_{eq}$  характеризует несгораемую часть угля (зола и остаток коксовой составляющей при неполном сгорании угольной частицы в условиях недостатка кислорода). Система дополняется уравнением теплопереноса от газа к частицам

$$\frac{\partial T_2}{\partial t} + u \frac{\partial T_2}{\partial x} = \frac{1}{\tau_T} (T_1 - T_2) \quad (3)$$

и уравнениями состояния (с учетом вышеприведенных предположений)

$$p = \rho(1 - \xi_2 - \xi_3)(\gamma(e_g) - 1)e_g, \quad e_g = c_{v,1}T_1, \quad (4)$$

$$E = \frac{u^2}{2} + (1 - \xi_2 - \xi_3)c_{v,1}T_1 +$$

$$+ (\xi_2 c_{v,2} + \xi_3 c_{v,3})T_2 + \xi_{12}Q_{12} + \xi_2Q_2 + \xi_3Q_3.$$

Для описания зависимости показателя адиабаты кислорода от внутренней энергии использовалось уравнение состояния Коренькова — Охитина [16]

$$\gamma = \begin{cases} \gamma_0 - \alpha_1(e_g/e_*)^\beta, & e_g \leq e_*, \\ \gamma_\infty + (\gamma_* - \gamma_\infty) \exp(\alpha_2(1 - e_g/e_*)), & e_g > e_*, \end{cases} \quad (5)$$

где определенные нами константы  $e_* = 0,7$  МДж/кг,  $\gamma_0 = 1,41$ ,  $\gamma_\infty = 1,234$ ,  $\gamma_* = 1,32$ ,  $\alpha_1 = 0,09$ ,  $\alpha_2 = 0,32$ ,  $\beta = 1,5$  позволяют адекватно описывать поведение показателя адиабаты кислорода  $\gamma$  в широком диапазоне температур в соответствии с [17]. В (3), (4)  $\tau_T = 2r^2\rho_{33}c_{v,23}/3\lambda_1\text{Nu}$  — характерное время теплообмена фаз;  $c_{v,1}, c_{v,2}, c_{v,3}$  — теплоемкости соответствующих компонентов,  $c_{v,23} = (c_{v,2}\xi_2 + c_{v,3}\xi_3)/(\xi_2 + \xi_3)$ ;  $\lambda_1$  — теплопроводность газа;  $r$  — радиус частицы;  $\rho_{33}$  — истинная плотность угля;  $\text{Nu}$  — число Нуссельта;  $Q_{12}, Q_2, Q_3$  — теплоты образования соответствующих компонентов. Система уравнений

(1)–(5) представляет собой 11 уравнений относительно  $\{\rho, u, E, p, T_1, T_2, \xi_{12}, \xi_2, \xi_3, \gamma, e_g\}$  и является замкнутой.

Распространение стационарных детонационных волн исследуется на основе модели Зельдовича — Неймана — Дёринга, в которой структура волны состоит из лидирующего замороженного ударного скачка и присоединенной к нему зоны химической реакции. В системе, связанной с фронтом, уравнения (1)–(3) сводятся к известным алгебраическим соотношениям

$$\rho u = c_1 = \rho_0 u_0, \quad p + \rho u^2 = c_2 = p_0 + \rho_0 u_0^2, \quad (6)$$

$$E + p/\rho = c_3 = E_0 + p_0/\rho_0$$

и дифференциальным уравнениям

$$\frac{d\xi_{12}}{dx} = -\frac{1}{\tau_{12}u} \xi_{12} \exp\left(-\frac{E_{12}}{RT_1}\right) + \frac{\xi_{12}^*}{\tau_2 u} \xi_2 \exp\left(-\frac{E_2}{RT_2}\right),$$

$$\frac{dT_2}{dx} = -\frac{1}{\tau_T u} (T_2 - T_1),$$

$$\frac{d\xi_2}{dx} = -\frac{1}{\tau_2 u} \xi_2 \exp\left(-\frac{E_2}{RT_2}\right), \quad (7)$$

$$\frac{d\xi_3}{dx} = -\frac{1}{\tau_3 u} (\xi_3 - \xi_{eq}) \exp\left(-\frac{E_3}{RT_2}\right),$$

где индекс 0 соответствует начальному состоянию,  $\xi_{eq}$  — массовая концентрация несгоревших частиц (зольный остаток). Начальным условием для системы (7) является состояние на фронте замороженной ударной волны (индекс  $s$ ), которое определяется из (6) и условий  $T_2 = T_0$ ,  $\xi_3 = \xi_{30}$ ,  $\xi_2 = \xi_{20}$ ,  $\xi_{12} = 0$ . Соответствующее уравнение для скорости газа после некоторых преобразований имеет вид

$$u_s = \frac{\gamma_s}{\gamma_s + 1} \frac{p_0 + \rho_0 u_0^2}{\rho_0 u_0} - \frac{\sqrt{B}}{\gamma_s + 1}, \quad \gamma_s = \gamma(e_{g,s}),$$

$$B = u_0^2 + 2 \frac{p_0}{\rho_0} \frac{\gamma_0 - \gamma_s^2}{\gamma_0 - 1} + \gamma_s^2 \frac{p_0}{\rho_0 u_0^2}. \quad (8)$$

Совместное решение уравнений (5), (6), (8) методом итераций позволяет определить все параметры на замороженной ударной волне.

Известно, что скорость детонационной волны  $u_0$  не может быть произвольной. В гетерогенных средах при фиксированном наборе времен релаксационных процессов минимально допустимая скорость детонации отвечает либо режиму Чепмена — Жуге, либо недосжато. При  $u_0 > u_{\min} \geq u_{CJ}$  реализуются пересажатые режимы детонации, которые не являются самоподдерживающимися. При  $u_0 < u_{\min}$  стационарных режимов нет. Скорость Чепмена — Жуге теоретически определяется из условия касания равновесной детонационной адиабаты и линии Рэлея — Михельсона; это условие дает связь между  $u_0$  и величинами, характеризующими тепловыделение химических реакций пиролиза, горения летучих и угольной частицы. Например, в случае идеального газа без учета зависимости показателя адиабаты от температуры эта связь имеет вид

$$\xi_2^0 \xi_{12}^* Q_{12} + (\xi_3^0 - \xi_{eq}) Q_3 + \xi_2^0 Q_{pyr} = \frac{\gamma_{eq}^2}{2(\gamma_{eq}^2 - 1)} \left(\frac{p_0}{\rho_0 u_0} + u_0\right)^2 - \frac{u_0^2}{2} - \frac{p_0}{\rho_0(\gamma_0 - 1)}, \quad (9)$$

где  $\gamma_0 = R(1 - \xi_3^0 - \xi_2^0)/[c_{v,1}(1 - \xi_3^0 - \xi_2^0) + c_{v,2}\xi_2^0 + c_{v,3}\xi_3^0]$ ,  $\gamma_{eq} = R(1 - \xi_{eq})/[c_{v,1}(1 - \xi_{eq}) + c_{v,3}\xi_{eq}]$ . При учете неидеального уравнения состояния (5) связь между  $u_0$  и  $Q_{12}$ ,  $Q_3$ ,  $Q_{pyr}$  становится неявной. Скорость нормальной детонации (Чепмена — Жуге) при заданных значениях  $Q_{12}$ ,  $Q_3$ ,  $Q_{pyr}$  определялась путем численного интегрирования уравнений (6), (7) при различных значениях  $u_0$  и анализа конечного равновесного состояния.

## 2. ВЫБОР ОСНОВНЫХ ПАРАМЕТРОВ РАСЧЕТА

Расчет параметров детонационных волн проведен для сферических частиц размера и состава, соответствующих экспериментальным данным [11]: диаметр частиц 25 мкм (16 % летучих) и 50 мкм (32 % летучих), зольный остаток 10 % исходной массы. Состояние перед фронтом ударной волны (начальное состояние):  $p_0 = 1$  атм,  $T_0 = 300$  К. Принято  $R = 260$  Дж/(кг·К),  $c_{v,2} = 2000$  Дж/(кг·К),  $c_{v,3} = 730$  Дж/(кг·К).

Характерное время тепловой релаксации  $\tau_T = 2r^2 \rho_{33} c_{v,23} / 3\lambda_1 \text{Nu}$  без учета обдува ( $\text{Nu} =$

2) составляет примерно 0,5 мс для частиц диаметром 25 мкм и 2 мс для 50 мкм. Учет зависимости числа Нуссельта от числа Рейнольдса приводит к следующим оценкам на замороженной ударной волне: 0,04 мс для 25 мкм и 0,12 мс для 50 мкм. Оценка длительности процесса скоростной релаксации в двухскоростном течении газа и частиц по формуле  $\tau_u = 4d\rho_{33}/3c_D\rho_{11}|u_1 - u_2|$  с учетом зависимости коэффициента сопротивления частицы от числа Маха УВ (по формулам Хендерсона или Карлссона — Хогланда) дает значение  $\tau_u \approx 0,012$  мс для фракции 25 мкм и  $\tau_u \approx 0,026$  мс для фракции 50 мкм. Это существенно меньше характерного времени прогрева даже при учете изменения числа Нуссельта. Тем самым подтверждается применимость односкоростной модели для описания основных процессов в среде (теплообмен, пиролиз, горение летучих, горение угля). Поэтому принимается  $Nu \approx 2$ , а температура воспламенения частицы и характерное время пиролиза определяются из условия согласования расчетных и экспериментальных данных по задержкам воспламенения частиц угля за ударными волнами.

Температура воспламенения частицы угля в ударных волнах по данным [4] равна примерно 750 К, в [15] приведены значения 650 ÷ 1000 К из разных работ, в настоящей работе принимается  $T_{ign} = 800$  К. Процесс пиролиза в статических условиях (медленный прогрев) характеризуется параметрами  $\tau_2 = 0,01$  мс,  $E_2/R = 8900$  К в кинетическом режиме и  $E_2 = 0$ ,  $\tau_2 = kd^2$ ,  $k \approx 10^6$  с/м<sup>2</sup> — в диффузионном [15]. Выделение летучих значительно ускоряется при ударно-волновой нагрузке на частицу, когда имеют место резкий нагрев, скачок давления и обдув. О влиянии этих факторов на процесс пиролиза можно заключить из сопоставления данных по задержкам воспламенения частицы угля за проходящими и отраженными ударными волнами [1, 2]. В [14] в рамках теории теплового взрыва получено соответствие экспериментальным данным [2] по задержкам воспламенения мелких частиц угля за отраженными ударными волнами (при среднем размере частиц 1 мкм  $E_2/R = 8900$  К,  $E_{12}/R = 18000$  К,  $\tau_{12} = 0,2 \cdot 10^{-8} (\xi_{22,0} - 0,09)^{-1,568}$  мс,  $\tau_2 = 0,2 \cdot 10^{-5}$  мс). В детонационных течениях условия соответствуют проходящим ударным волнам. Считая, что перечисленные выше факторы ударно-волнового воздействия на частицу влияют, главным образом, на процесс выделе-

ния летучих, значения  $E_{12}$ ,  $\tau_{12}$  мы взяли такими же, как и в [14]. Выбор  $E_2$  и  $\tau_2$  для принятого температурного критерия воспламенения ( $T_{ign} = 800$  К) проводился в соответствии с приведенными в [1] экспериментальными данными по задержкам воспламенения частиц угля за проходящими ударными волнами. В широком диапазоне температур за ударной волной расчетные данные в рамках нашей модели соответствуют данным [1] при  $E_2/R = 8900$  К и  $\tau_2 = 0,2 \cdot 10^{-4}$  мс.

Энергия активации процесса горения угля по данным [14, 15, 18] варьируется в диапазоне  $(2,3 \div 5) \cdot 10^6$  Дж/кг. Здесь принимается  $E_3 = 3 \cdot 10^6$  Дж/кг,  $\tau_3 = 0,02$  мс и 0,08 мс для частиц размером 25 и 50 мкм соответственно. При этом среднее время сгорания угольной частицы отвечает приведенной в [19] обобщающей многочисленные экспериментальные данные зависимости  $t = kd^2$ , где  $k = 3 \cdot 10^{-2}$  мс/мкм<sup>2</sup> для воздуха и  $k = 6,6 \cdot 10^{-3}$  мс/мкм<sup>2</sup> для кислорода.

Модель также приведена в соответствие экспериментальным данным [11] по зависимости скорости нормальной детонации от начальной концентрации частиц путем определения обобщенных констант  $Q_{12}$ ,  $Q_3$  и степени недогорания частицы  $\xi_{eq}$ . Теплопоглощение при пиролизе  $Q_{pyr} = Q_2 - \xi_{12}^* Q_{12}$  много меньше тепловыделения химических реакций; в соответствии с [15] принимается  $Q_{pyr} = -10^5$  Дж/кг. Для  $Q_{12}$ ,  $Q_3$ ,  $\xi_{eq}$  приняты аппроксимационные зависимости, учитывающие переход от преобладающей реакции с образованием диоксида углерода к реакции с образованием оксида углерода, а также учитывающие увеличение несгораемого остатка при концентрациях частиц, превышающих стехиометрическое значение:

$$Q_j = \begin{cases} Q_j^1, & \xi_{30} \leq \xi_{s,1}, \\ \frac{Q_j^2((\xi_{30} - \xi_{s,1}) + Q_j^1(\xi_{s,2} - \xi_{30}))}{\xi_{s,2} - \xi_{s,1}}, & \xi_{s,1} < \xi_{30} \leq \xi_{s,2}, \quad j = 12, 3, \\ Q_j^2, & \xi_{30} > \xi_{s,2}, \end{cases} \quad (10)$$

$$\xi_{eq} = 0, 1(\xi_{30} + \xi_{20}) + \vartheta \max(0, (\xi_{30} - \xi_{s,2})).$$

Определены следующие значения входящих констант: для частиц угля размером 25 мкм (16 % летучих)  $Q_{12}^1 = 18 \cdot 10^6$  Дж/(кг·К),  $Q_{12}^2 = 10 \cdot 10^6$  Дж/(кг·К),  $Q_3^1 = 9 \cdot 10^6$  Дж/(кг·К),  $Q_3^2 = 3,2 \cdot 10^6$  Дж/(кг·К),  $\xi_{s,1} = 0,25$ ,  $\xi_{s,2} = 0,4$ ,  $\vartheta = 2,2$ ; для частиц размером 50 мкм (32 %

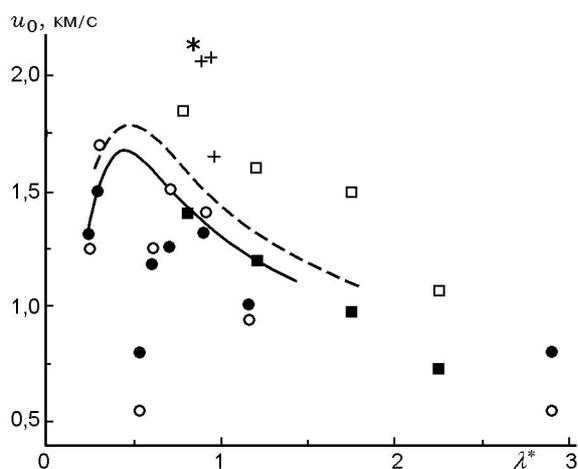


Рис. 1. Зависимость скорости детонации от начального содержания угля:

○, ● — частицы диаметром 54 мкм; □, ■ — 25 мкм (по данным [11]); \* — до 75 мкм, + — до 120 мкм (по данным [12]); сплошная линия — расчет для частиц диаметром 50 мкм, штриховая — расчет для частиц 25 мкм

летучих)  $Q_{12}^1 = 14 \cdot 10^6$  Дж/(кг·К),  $Q_{12}^2 = 7 \cdot 10^6$  Дж/(кг·К),  $Q_3^1 = 9 \cdot 10^6$  Дж/(кг·К),  $Q_3^2 = 2,1 \cdot 10^6$  Дж/(кг·К),  $\xi_{s,1} = 0,2$ ,  $\xi_{s,2} = 0,3$ ,  $\vartheta = 3$ .

На рис. 1 приведены данные работ [11, 12] и расчетные кривые зависимости скорости детонации от начального соотношения концентраций угля и кислорода в смеси  $\lambda^* = (\xi_{30} + \xi_{20})/\xi_{10}$ . Расчеты согласуются с данными экспериментов [11] в пределах разброса представленных экспериментальных данных.

### 3. СТАЦИОНАРНЫЕ СТРУКТУРЫ

Результаты расчетов параметров волны стационарной детонации для частиц размером 25 мкм (16 % летучих, из них горючая часть составляет 69 %) представлены на рис. 2 для двух значений начальной концентрации частиц:  $\xi_{30} = 0,25$  ( $u_0 = 1,79$  км/с) и  $\xi_{30} = 0,44$  ( $u_0 = 1,36$  км/с). В первом случае определяется максимальное значение скорости детонации (см. рис. 1), давление за фронтом превышает 50 атм, а температуры в зоне реакции достигают 3200 К. Второй случай относится к области значительного недогорания частицы в условиях недостатка кислорода, здесь максимальные температуры около 2000 К, давление на фронте 45 атм, остаточная концентрация  $\xi_{eq} = 0,14$ . На рис. 2,а показаны распределения концентраций угля и связанных лету-

чих в частице угля, скорость газа и число Маха по равновесной скорости звука при  $\xi_{30} = 0,25$  ( $u_0 = 1,79$  км/с), на рис. 2,б — те же параметры для  $\xi_{30} = 0,44$  ( $u_0 = 1,36$  км/с). Как видно из рис. 2,а-в, выделение летучих (одновременно с нагревом частицы) до некоторого момента сопровождается падением скорости и температуры газа. При этом давление и плотность смеси несколько возрастают (в приведенном масштабе рис. 2,г эта стадия неразличимо мала). Когда горение летучих становится преобладающим, температура газа и скорость смеси вновь возрастают (см. рис. 2,а-в), а давление и плотность падают (см. рис. 2,г). Таким образом, горение летучих препятствует формированию  $\rho$ -слоя за ударной волной (многократного увеличения плотности смеси), свойственного, например, детонационным течениям аэровзвешей алюминия [13]. Поскольку горение летучих происходит очень быстро, присутствие горючей части летучих в газовой фазе ( $\xi_{12}$ ) мало и на рис. 2 не приводится. Когда выделившиеся летучие сгорают полностью, определяющими процессами становятся теплообмен и горение частицы. Пока доминирует тепловая релаксация, температура газа и скорость смеси опять несколько снижаются, а давление и плотность возрастают. На стадии интенсивного горения коксовой составляющей частицы температура газа, скорость смеси, число Маха вновь возрастают одновременно с уменьшением давления и плотности. Но так как процесс горения кокса более длительный, чем горение летучих, то изменение параметров течения здесь происходит более плавно. Период тепловой релаксации равен примерно  $0,5 \div 1,5$  мс (см. рис. 2,в), а выход на конечное равновесное состояние Чепмена — Жуге ( $M_e = 1$ ) — около 4 мс при  $\xi_{30} = 0,25$  и 15 мс при  $\xi_{30} = 0,44$ , что обусловлено различием температур при горении кокса.

Качественные особенности структуры течения сохраняются и для частиц размером 50 мкм (32 % летучих, горючая часть летучих 78 %). Результаты расчетов представлены на рис. 3 для  $\xi_{30} = 0,15$  (расчетное значение скорости детонации 1,49 км/с) и  $\xi_{30} = 0,2$  (1,67 км/с). Быстрое выделение и горение летучих при относительно медленном протекании процесса тепловой релаксации обуславливает зигзагообразное поведение скорости, числа Маха и температуры газа. Тепловая релаксация длится  $3 \div 6$  мс, при этом температура газа после сгорания летучих несколько уменьшает-

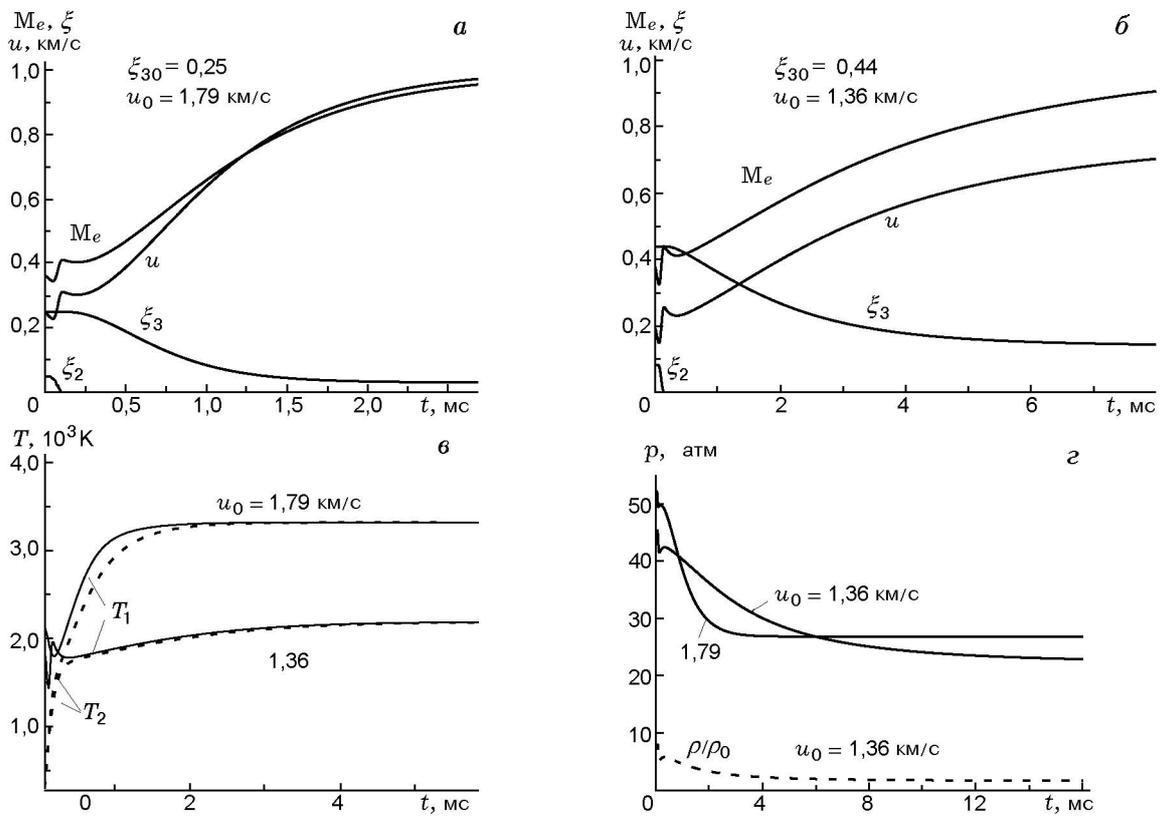


Рис. 2. Структура течения за фронтом детонационной волны для частиц диаметром 25 мкм

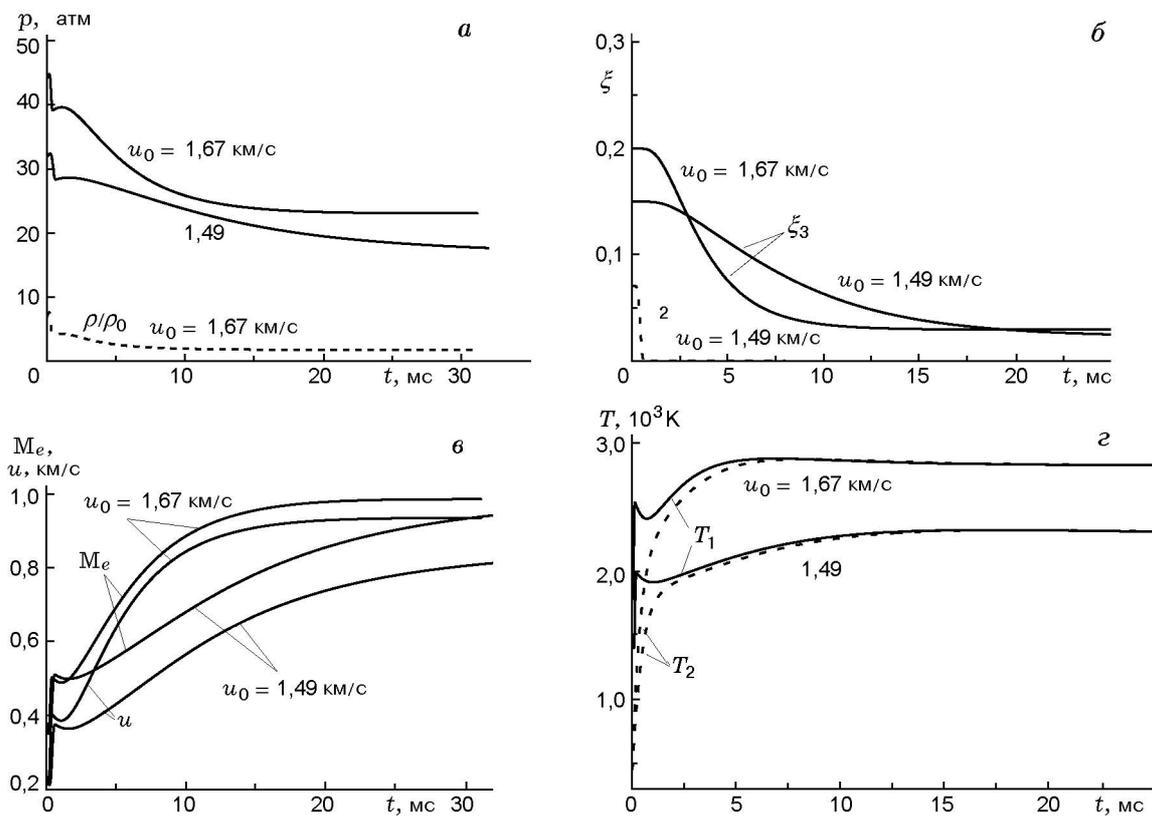


Рис. 3. Структура течения за фронтом детонационной волны для частиц диаметром 50 мкм

ся, а в процессе горения угля снова возрастает. Время горения частицы  $15 \div 30$  мс, что много больше времен скоростной релаксации и пиролиза. Как видно, предельным значением равновесного числа Маха и здесь является 1 (стационарная детонация отвечает режиму Чепмена — Жуге), а установление динамических параметров течения смеси происходит за время  $\approx 30$  мс при  $\xi_{30} = 0,2$  и  $50$  мс при  $\xi_{30} = 0,15$ .

Из сравнения длительностей релаксационных процессов в смеси можно заключить следующее. Время выхода летучих сравнимо с периодом скоростной релаксации, а время горения летучих еще меньше, поэтому в описании процесса детонации газозвеси частиц угля допустимо пренебрегать наличием в газе горючей части летучих, объединив процесс пиролиза и горения летучих в один, как это иногда и делается [15]. Для более детального исследования параметров непосредственно за фронтом замороженной ударной волны (в зоне задержки воспламенения) необходимо привлечение двухскоростной модели. Время скоростной неравновесности сопоставимо с периодом задержки воспламенения, что требует уточнения критерия воспламенения с учетом различия скоростей фаз (т. е. определения  $T_{ign}$  и констант, определяющих выход летучих, в соответствии с экспериментальными данными по задержкам воспламенения в проходящих ударных волнах).

#### 4. УДАРНО-ВОЛНОВОЕ ИНИЦИИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ

Для подтверждения устойчивого распространения стационарных структур численно решается задача ударно-волнового инициирования детонации в нестационарной постановке. В результате инициирования формируются стационарные волны, распространяющиеся в самоподдерживающемся режиме. Рассматривается полупространство, часть которого заполнена нагретым и сжатым газом (продукты детонации), а остальная часть — равномерно распределенной смесью газа и частиц угля. Предположим, что в начальный момент времени происходит разрушение разделяющей перегородки. Начально-краевая задача для уравнений (1)–(4) формулируется в виде

$$t = 0, \quad \varphi = \begin{cases} \varphi_l, & 0 < x < l, \\ \varphi_0, & l < x \leq L, \quad L \gg l, \end{cases} \quad (11)$$

где  $\varphi = \{\rho, u, E, \xi_{12}, \xi_2, \xi_3, T_2\}$  — вектор решения,  $\varphi_l = \{\rho_l, 0, E_l, 0, 0, \xi_{eq}, T_l\}$  — состояние внутри камеры,  $\varphi_0$  — начальное состояние смеси,  $l$  — ширина камеры,  $L$  — ширина расчетной области. При  $x = 0$  задавались условия симметрии, на правой границе — условия, отвечающие начальному состоянию. Для упрощения горение летучих считалось мгновенным ( $\xi_{12} = 0$ ).

Решение уравнений проводилось численно на основе метода, разработанного для расчета нестационарных детонационных процессов в газозвеси частиц алюминия [20]. Для определения  $\{\rho, \rho u, \rho E\}$  из уравнений (1) применялась модификация схемы ТВД с поправками на собственные векторы при учете формул (4), (7) в соответствии с [21], интегрирование  $\{\xi_2, \xi_3, T_2\}$  проводилось с использованием пакета GEAR решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений вдоль траектории с последующей интерполяцией на узлы конечно-разностной сетки.

Результаты расчетов для частиц угля размером  $10$  мкм (при всех остальных характеристиках, отвечающих частицам угля размером  $25$  мкм в [11]) и начальных параметров  $\rho_l = 40$  кг/м<sup>3</sup>,  $T_l = 4500$  К,  $\xi_{30} = 0,25$  представлены на рис. 4,а в виде профилей давления газа и скорости смеси с временным шагом  $0,5$  мс. Видно, что сначала в смеси инициируется пересжатая детонационная волна, которая затем постепенно ослабляется под действием волны разрежения и асимптотически выходит на стационарный режим. Скорость распространения фронта, определяемая на конечно-разностной сетке ( $1,76$  км/с), отличается от соответствующей скорости Чепмена — Жуге ( $1,79$  км/с) в пределах численной погрешности.

На рис. 4,б показана структура сформированной волны (температуры газа и частиц) для частиц диаметром  $25$  мкм, которая практически во всей зоне тепловой релаксации (намного превышающей зону выделения и сгорания летучих и сравнимой с зоной горения коксовой составляющей) соответствует представленным на рис. 2,в стационарным решениям при  $u_0 = 1,79$  км/с. Небольшие различия имеются в зоне конечного равновесного состояния, что обусловлено неполным установлением. Устойчивое распространение в численных экспериментах детонационных структур, сформированных в результате инициирования, свидетельствует также об устойчивости плос-

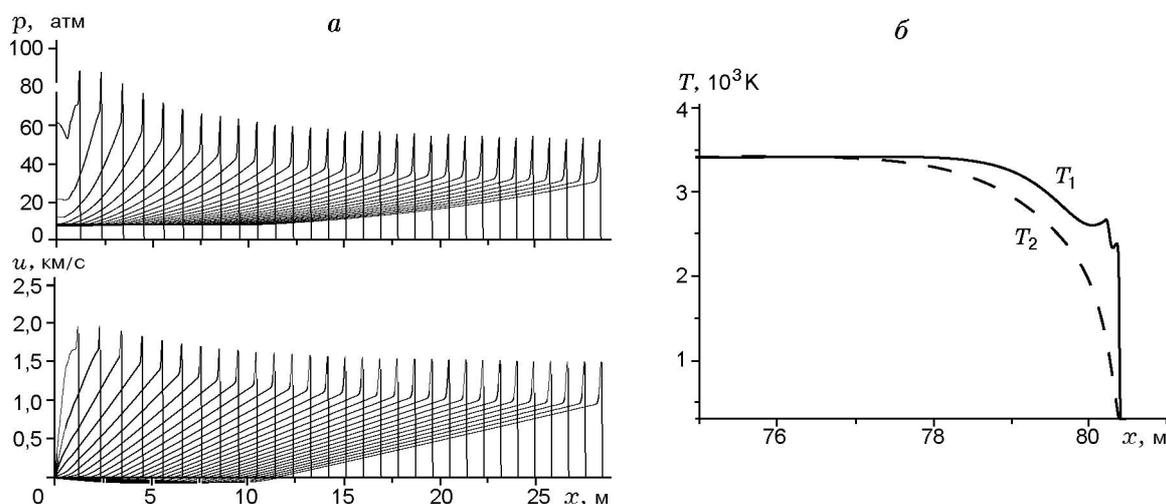


Рис. 4. Иницирование детонационных волн:

$a$  — установление стационарной волны детонации,  $d = 10$  мкм,  $\Delta t = 0,5$  мс;  $b$  — структура установившегося решения,  $d = 25$  мкм

ких стационарных волн детонации относительно малых одномерных возмущений.

## ВЫВОДЫ

1. Предложена математическая модель для описания детонационных процессов в газозвеси частиц угля в воздухе или кислороде, основанная на представлениях механики гетерогенных сред в односкоростном двухтемпературном приближении и учитывающая процессы пиролиза, горения летучих и коксовой составляющей частицы.

2. Модель приведена в соответствие экспериментальным данным по зависимости скорости детонации от концентрации частиц в газозвеси; по задержкам воспламенения частиц угля за проходящими ударными волнами и по горению частиц.

3. Получены и проанализированы стационарные структуры нормальной детонации Чепмена — Жуге для двух фракций угольной взвеси в кислороде и значений концентрации частиц, соответствующих условиям экспериментов [11].

4. Определен режим формирования и устойчивого распространения плоских детонационных волн с асимптотическим выходом на течение Чепмена — Жуге на основе численных расчетов процесса ударно-волнового инициирования детонации в газоугольной смеси.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Борисов А. А., Гельфанд Б. Е., Цыганов С. А. и др. Воспламенение пылей за ударными волнами // Хим. физика. 1983. № 8. С. 1127–1128.
2. Бойко В. М., Папырин А. Н., Поплавский С. В. О влиянии летучих на задержки воспламенения газозвесей угольных пылей в ударных волнах // Физика горения и взрыва. 1991. Т. 27, № 2. С. 101–111.
3. Медведев А. Е., Федоров А. В., Фомин В. М. Описание воспламенения и горения смесей газа и твердых частиц методами механики сплошной среды // Физика горения и взрыва. 1984. Т. 20, № 2. С. 3–9.
4. Nettleton M. A., Stirling R. The ignition of clouds of particles in shock-heated oxygen // Proc. Roy. Soc. 1968. V. A300. P. 62–77.
5. Абинов А. Г., Чеховских А. М. Экспериментальное исследование детонации, возникающей при взрывах метана и угольной пыли в шахтах // Детонация. Критические явления. Физико-химические превращения в ударных волнах. Черноголовка, 1978. С. 54–61.
6. Левин В. А., Туник Ю. В. Горение угольной пыли в кислороде с примесью газообразного топлива // Докл. АН СССР. 1984. Т. 276, № 4. С. 834–839.
7. Левин В. А., Туник Ю. В. Детонация в метановоздушной газозвеси угольной пыли // Механика реагирующих сред и ее приложения. Новосибирск: Наука, 1989. С. 106–122.
8. Левин В. А., Туник Ю. В. Иницирование детонационного горения угольной пыли в метановоздушной смеси // Физика горения и взрыва. 1987. Т. 23, № 1. С. 3–8.

9. **Nettleton M. A., Stirling R.** Detonation in suspensions of coal dust in oxygen // *Combust. Flame*. 1973. V. 21. P. 307–314.
10. **Залесинский М., Вуйтицкий С.** Механизм образования и распространения детонации в смеси угольной пыли и газового окислителя // *Физика аэродисперсных систем*. Киев; Одесса, 1978. Вып. 18. С. 73–75.
11. **Эдвардс Д., Фернлей Р., Неттлтон М.** Исследование детонации взвесей угольной пыли в смесях кислорода с азотом в ударной трубе // *Физика горения и взрыва*. 1987. Т. 23, № 2. С. 129–136.
12. **Fangrat J., Glinka W., Wolanski P., Wolinski M.** Detonation structure in organic dust-oxygen mixtures // *Arch. Combust.* 1987. V. 7, N 3/4. P. 321–332.
13. **Fedorov A. V., Fomin V. M., Khmel' T. A.** Mathematical modeling of catastrophic explosions of dispersed aluminum dust // *Prevention of Hazardous Fires and Explosions* / V. E. Zarko et al. (Eds). Kluwer Academic Publ., 1999. P. 287–299.
14. **Гостеев Ю. А., Федоров А. В.** Воспламенение газозвеси частиц угля. Точечное приближение // *Физика горения и взрыва*. 2001. Т. 37, № 6. С. 36–45.
15. **Волков Э. П., Зайчик Л. И., Першуков В. А.** Моделирование горения твердого топлива. М.: Наука, 1994.
16. **Кореньков В. В., Охитин В. Н.** Численная оценка влияния плотности ВВ на параметры воздушных ударных волн // *ПМТФ*. 1983. № 3. С. 127–130.
17. **Вартгафтик Н. Б.** Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Физматгиз, 1963.
18. **Wall T. E., Gururajan V. S.** Combustion kinetics and the heterogeneous ignition of pulverized coal // *Combust. Flame*. 1986. V. 66. P. 151–157.
19. **Libby P. A., Blake T. A.** Theoretical study of burning carbon particles // *Combust. Flame*. 1979. V. 36. P. 139–169.
20. **Федоров А. В., Хмель Т. А.** Взаимодействие детонационных волн и волн разрежения в аэрозвеси частиц алюминия в кислороде // *Физика горения и взрыва*. 1997. Т. 33, № 2. С. 102–110.
21. **Montagne J. L., Vinokur M.** Comparative study of high resolution shock capturing schemes for a real gas // *AIAA Journal*. 1989. V. 27, N 10. P. 1332–1347.

*Поступила в редакцию 29/XII 2001 г.,  
в окончательном варианте — 28/I 2002 г.*

---