

ИССЛЕДОВАНИЕ ЯЧЕИСТОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ ДЕТОНАЦИИ КРИОГЕННОЙ ВОДОРОДОКИСЛОРОДНОЙ ГАЗОВЗВЕСИ

С. А. Ждан, Е. С. Прохоров

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, zhdan@hydro.nsc.ru

С использованием математической модели двухфазной двухскоростной среды численно исследована регулярная ячеистая структура при детонации криогенной смеси (газообразный водород — капли жидкого кислорода) в плоском канале. Получены данные о размере ячеек, их форме, а также относительной высоте неровностей детонационного фронта. Изучено влияние начального давления и химического состава смеси на геометрические характеристики ячейки.

Ключевые слова: гетерогенная детонация распылов, ячеистая структура, численное моделирование, криогенная газовзвесь, газообразный водород, жидкий кислород, диаметр капель.

Из экспериментов [1, 2] и результатов численного моделирования [3–5] известно, что в любых газовых реагирующих смесях детонационная волна (ДВ) имеет многофронтную ячеистую структуру. За передним ударным фронтом формируются сильные неоднородности — поперечные ударные или детонационные волны. Столкновение поперечных волн, движущихся во встречных направлениях, приводит к воспроизводству многофронтной структуры во времени. В точках сопряжения переднего фронта и поперечных волн возникают «изломы», которые разделяют плавно искривленные участки переднего фронта. Пространство, через которое проходит ДВ, делится траекториями точек изломов на ромбовидные ячейки с характерными поперечными (a) и продольными ($b = 1,4 \div 1,9a$ [6]) размерами. Размер ячейки служит характерным пространственным масштабом структуры фронта ДВ в газах.

В экспериментах [7–9] показана возможность существования гетерогенной (газ — капли) детонации при низком начальном давлении паров жидкого компонента и выяснена общая картина физико-химических процессов при взаимодействии фаз в зоне реакции ДВ. В распылах углеводородных топлив в газообразном окислителе при диаметре капель жидкой фазы $d_0 \geq 50$ мкм в структуре гетерогенной ДВ не наблюдалось поперечных неоднородностей в виде ячеистых структур. В то же время при детонации распылов мелких капель декана диаметром $d_0 \approx 2$ мкм в кислороде получены спи-

новые режимы [10], а в распылах капель декана диаметром $d_0 \approx 5$ мкм в кислороде и воздухе обнаружены многофронтные ячеистые структуры гетерогенной ДВ [11]. Размер ячейки при детонации распыла оказался примерно в два раза больше, чем в гомогенной (нагретой до 185°C) смеси того же состава. Это подтверждает существенное влияние физических процессов тепло- и массообмена на длину зоны химической реакции.

При численном моделировании детонации криогенной ($T_0 = 80$ К) стехиометрической газовзвеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ (газообразный водород — капли жидкого кислорода) в плоском канале [12] впервые получена поперечная неустойчивость двумерной зоны реакции (вплоть до распыла капель с $d_0 = 100$ мкм) в виде ячеистых структур с размерами ячеек, зависящими от диаметра капель. Установлено, что гетерогенная ДВ выходит на периодический режим с регулярной ячеистой структурой при ширине канала, кратной поперечному размеру ячейки. Анализ ячеистой структуры ДВ показал, что из-за низкой температуры газовой фазы за передним ударным фронтом протяженность зоны индукции химических реакций в любой момент времени находится в диапазоне $l_{ind} \in (0,04 \div 0,2)a$. Поэтому поперечная волна состоит из ударной волны и примыкающей к ней волны сжатия с энерговыведением в зоне реакции. Длина зоны полного энерговыведения определяется скоростью поступления массы из капель в газовую фазу и при $d_0 = 100$ мкм она на порядок больше l_{ind} .

В настоящей работе по математической модели [12] исследовано влияние начального

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 99-01-00553 и 00-15-96181).

Т а б л и ц а 1

φ	p_0 , атм	d_0 , мкм	Δt , мкс	D_{\max} , км/с	D_{\min} , км/с	D_0 , км/с	L_0 , мм
0,5	1	25	1,530	4,61	2,20	3,10	4,737
0,5	2	50	2,428	4,32	2,11	2,92	7,079
0,5	1	50	3,362	4,56	2,23	3,08	10,36
0,5	0,5	50	4,530	4,70	2,29	3,20	14,50
0,5	1	100	7,422	4,40	2,22	3,03	22,45
1	1	25	2,581	4,71	2,43	3,29	8,523
1	2	50	3,908	4,48	2,34	3,11	12,15
1	1	50	5,809	4,66	2,40	3,22	18,68
1	0,5	50	7,858	4,88	2,46	3,35	26,32
1	1	100	12,08	4,47	2,42	3,19	38,50
2	1	25	4,444	5,02	2,61	3,48	15,46
2	2	50	5,706	4,72	2,85	3,44	19,60
2	1	50	9,126	4,90	2,67	3,46	31,58
2	0,5	50	13,79	5,03	2,64	3,50	48,35
2	1	100	18,44	4,75	2,75	3,45	63,58

давления и химического состава криогенной водородокислородной газозвеси на размер регулярной ячейки гетерогенной ДВ.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В плоском канале шириной y_0 находится монодисперсный распыл капель жидкого кислорода диаметром d_0 и средней плотностью $\rho_{20} = \alpha_{20}\rho_2^0$ ($\rho_2^0 = 1135 \text{ кг/м}^3$ — истинная плотность, α_{20} — объемная концентрация капель) в газообразном водороде с начальными давлением p_0 и температурой T_{10} . По каналу (вдоль оси x) распространяется самоподдерживающаяся гетерогенная ДВ. Требуется определить минимальную ширину канала $y_0 = y_*$, при которой в зоне химической реакции ДВ реализуется двумерное периодическое решение с двумя встречными поперечными волнами, симметричными относительно средней линии канала $y = y_*/2$. Это означает, что на ширине канала укладывается одна регулярная ячейка ($a = y_*$).

Математическая модель, сформулированная в рамках уравнений механики двухфазной многоскоростной среды [13], и метод ее численного решения приведены в [12]. Исследование выполнено для криогенной газозвеси $2\varphi\text{H}_2 + \text{O}_2$ — монодисперсный распыл капель

кислорода в газообразном водороде при начальной температуре $T_{10} = T_{20} = 80 \text{ К}$. При заданных термодинамических свойствах фаз (см. [12]) решение задачи зависит от начального давления водорода p_0 , диаметра капель кислорода d_0 и эквивалентного отношения φ , определяющего исходный химический состав смеси. При фиксированных значениях p_0 и φ начальные истинная (ρ_1^0) и средняя (ρ_{10}) плотности газообразного водорода, а также объемная концентрация капель кислорода определяются из соотношений

$$\rho_1^0 = p_0\mu_{\text{H}_2}/RT_{10}, \quad \alpha_{20} = (1 + \varphi\rho_2^0/8\rho_1^0)^{-1},$$

$$\rho_{10}/\rho_{20} = \varphi/8,$$

где μ_{H_2} — молярная масса водорода, R — универсальная газовая постоянная. В частности, для стехиометрической смеси ($\varphi = 1$) при $p_0 = 1 \text{ атм}$ имеем $\rho_{10} = 0,305 \text{ кг/м}^3$, $\alpha_{20} = 2,15 \cdot 10^{-3}$, $\rho_{20} = 2,44 \text{ кг/м}^3$.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Результаты одномерных расчетов. В расчетах исходные параметры варьировались в следующих пределах: $0,5 \leq \varphi \leq 2$, $0,5 \leq p_0 \leq$

Т а б л и ц а 2

φ	p_0 , атм	d_0 , мкм	D_{\max} , км/с	D_{\min} , км/с	$\langle D \rangle$, км/с	a , мм	a/b	h/a
0,5	1	50	6,13	1,65	2,82	15,6	0,629	0,255
1	1	25	7,23	1,75	3,00	11,2	0,566	0,276
1	2	50	5,64	2,27	3,03	13,6	0,499	0,190
1	1	50	7,34	1,94	3,09	21,1	0,585	0,247
1	0,5	50	7,07	1,76	3,04	32,8	0,550	0,287
1	1	100	5,58	2,05	3,04	44,3	0,500	0,232
2	1	25	7,05	2,19	3,37	20,4	0,561	0,239
2	2	50	6,10	2,73	3,44	29,3	0,528	0,160
2	1	50	7,87	2,35	3,37	46,4	0,575	0,220
2	0,5	50	7,50	2,09	3,32	62,6	0,564	0,255
2	1	100	5,73	2,57	3,41	88,8	0,509	0,191

2 атм, $25 \leq d_0 \leq 100$ мкм. Так как в одномерной постановке задачи [14] детонация криогенной водородокислородной газовзвеси распространяется в пульсирующем (автоколебательном) режиме с пространственным периодом продольных пульсаций скорости волны L_0 , а в двумерной постановке [12] для стехиометрической газовзвеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ при $p_0 = 1$ атм получена корреляция между периодом продольных пульсаций и поперечным размером ячейки ($a \sim L_0$), то предварительно проведены одномерные расчеты гетерогенной ДВ, в которых параметры p_0 , d_0 и φ варьировались в указанных пределах. Количественная информация о пространственном и временном (Δt) периодах продольных колебаний скорости ДВ, ее амплитуда и средняя за период скорость детонации ($D_0 = L_0/\Delta t$) для ряда значений φ , p_0 , d_0 представлены в табл. 1. Видно, что период продольных пульсаций является почти линейной функцией диаметра капель кислорода, хотя значение средней скорости D_0 практически не зависит от d_0 . С увеличением доли водорода (с увеличением φ) в смеси значения D_0 монотонно растут. Данные одномерных расчетов для L_0 можно с точностью до 10 % аппроксимировать зависимостью

$$L_0 \sim d_0^{1,07} p_0^{-0,58} \varphi^{0,8}.$$

Рассматривалось влияние неточности современных знаний о химической задержке воспламенения на период продольных пульсаций

L_0 . Известно [15], что выражение для химической задержки воспламенения водородокислородной смеси

$$t_{ind} = 5,38 \cdot 10^{-11} [\text{O}_2]^{-1} \exp\left(\frac{17150}{RT}\right) \text{ [моль} \cdot \text{с/л]}$$

аппроксимирует экспериментальные данные с точностью 50 %. Варьирование в одномерных расчетах предэкспоненциального множителя t_{ind} в ± 2 раза приводит к изменению L_0 не более чем на ± 20 %. Последний результат означает, что в криогенных водородокислородных газовзвесах, в отличие от реагирующих газов, неточность в значениях t_{ind} существенно меньше влияет на характерные линейные размеры структуры ДВ.

Анализ расчетов детонационной ячейки. Для определения в двумерных нестационарных расчетах периодического по координате y решения и нахождения собственного значения задачи y_* , равного одному поперечному размеру регулярной ячейки ($y_* = a$), использовался следующий алгоритм. Поскольку существует корреляция $a \sim L_0$ [12], для поиска ширины канала y_0 вначале выбирался интервал $0,5L_0 < y_0 < 2L_0$. В дальнейшем этот интервал сужался методом дихотомии (деления пополам) до тех пор, пока не совпадали зависимости продольной скорости переднего ударного фронта $D = D(t)$ на обеих стенках канала. Для регулярных ячеистых структур это происходило на длине канала $\simeq 35 \div 40a$. Заметим, что продольная скорость волны весьма чувствительна к изменению ширины канала y_0 . Так, отклонение y_0 от y_* на

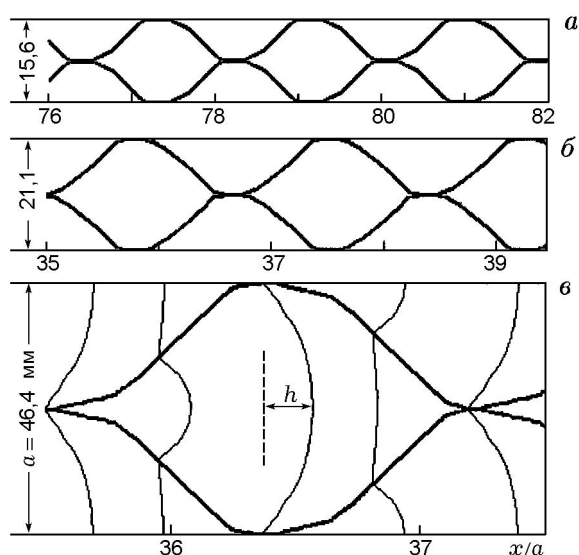


Рис. 1. Размер и форма ячеек для газовзвесей с различным химическим составом:

$p_0 = 1$ атм, $d_0 = 50$ мкм; а — $\text{H}_2 + \text{O}_2$, б — $2\text{H}_2 + \text{O}_2$, в — $4\text{H}_2 + \text{O}_2$

несколько процентов уже приводит к несовпадению профилей скоростей на противоположных стенках канала, в то время как симметричность формы переднего ударного фронта и фронта воспламенения еще не нарушается.

При ширине канала, равной собственному значению ($y_0 = y_*$), скорость D меняется периодически с временным периодом t_b и пространственным периодом b , который в данном случае соответствует продольному размеру ячейки. Расчетные значения D_{\min} , D_{\max} и средней за период скорости переднего фронта ДВ $\langle D \rangle = b/t_b$ приведены в табл. 2. Скорость $\langle D \rangle$ коррелирует со средней скоростью одномерной детонации D_0 , причем всегда $D_0 \geq \langle D \rangle$. Ранее [12] в расчетах детонации криогенной смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ ($\varphi = 1$, $p_0 = 1$ атм) было установлено, что поперечный размер ячейки a растет почти линейно с увеличением диаметра капле кислорода d_0 , а средняя скорость двумерной ДВ $\langle D \rangle$ практически не меняется. Представленные в табл. 2 результаты подтверждают, что такая закономерность существует и при варьировании начального химического состава криогенной водородокислородной газовзвеси.

В структуре ДВ (при $y_0 = y_*$) формируются два поперечных возмущения с симметричной относительно средней линии канала $y = y_*/2$ газодинамической картиной течения,

что обеспечивает регулярность детонационных ячеек, образуемых траекториями точек изломов переднего фронта. На рис. 1 представлены результаты расчетов размера и формы ячеек для газовзвесей трех различных химических составов ($\varphi = 0,5; 1; 2$). Видно что, с увеличением доли водорода (рост φ) в гетерогенной смеси линейные размеры ячейки возрастают. Отметим, что в газовых реагирующих смесях регулярные ячейки — явление редкое. Например, в водородокислородных смесях они наблюдаются, лишь когда смесь сильно разбавлена аргоном. В газах более типичны нерегулярные структуры фронта, когда одновременно образуются ячейки целого диапазона размеров [6].

Параметром, характеризующим форму ячейки, принято считать отношение продольного размера ячейки к поперечному (a/b). В газовых смесях с нерегулярной ячейистой структурой $a/b = 0,63 \pm 0,06$. С увеличением степени регулярности ячейистой структуры отношение a/b уменьшается и для смесей с очень регулярной ячейкой $a/b = 0,56 \pm 0,03$ [6]. Сопоставление экспериментальных данных [6] с результатами расчетов (см. табл. 2) показывает, что при детонации водородокислородной газовзвеси отношение a/b уменьшается до 0,5, т. е. в гетерогенной смеси ячейка может быть более вытянута в продольном направлении, чем в реагирующих газах. Из геометрических соображений для регулярных ячеек справедливо соотношение $a/b = \langle v \rangle / \langle D \rangle$, где $\langle v \rangle$ — средняя скорость поперечных волн. Используя данные табл. 2, легко оценить $\langle v \rangle$.

Варьированием в расчетах начального давления p_0 установлено, что с ростом p_0 уменьшаются линейные размеры детонационной ячейки в гетерогенной смеси. Зависимости $a(p_0)$ при начальном диаметре капле $d_0 = 50$ мкм представлены на рис. 2. Там же изображены (штриховые линии) зависимости $L_0(p_0)$. Наблюдается корреляция между a и L_0 . Расчетные данные о влиянии начального давления газовой фазы на поперечный размер ячеек, как и для реагирующих газовых смесей, хорошо описываются зависимостями $\lg a = A - B \lg p_0$, где A и B — константы, зависящие от химического состава смеси. Если для газовых смесей $B \simeq 1$ [1, 6], то для криогенных газовзвесей $2\varphi\text{H}_2 + \text{O}_2$ зависимость от начального давления более слабая: $B \simeq 0,6$.

Форма фронта гетерогенной ДВ. На рис. 1, в показаны положение и форма переднего удар-

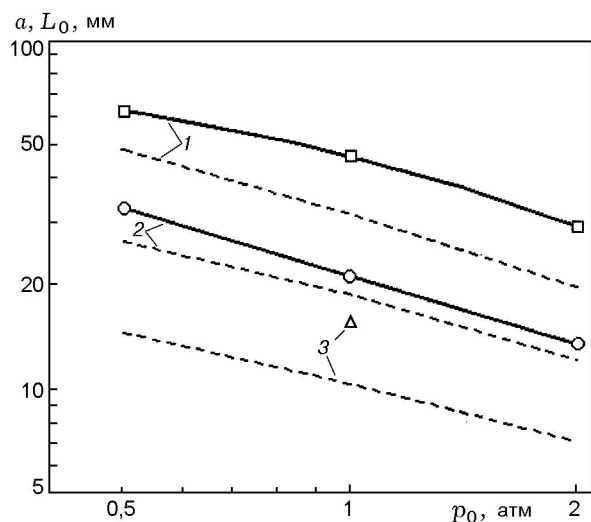


Рис. 2. Зависимости поперечного размера ячейки от начального давления:

1 — $4\text{H}_2 + \text{O}_2$, 2 — $2\text{H}_2 + \text{O}_2$, 3 — $\text{H}_2 + \text{O}_2$; штриховые линии — период одномерных продольных пульсаций L_0

ного фронта ДВ для пяти последовательных моментов времени. Фронт ДВ не является гладким, на рисунке хорошо видны точки изломов, где он сопрягается с поперечными волнами. В качестве характеристики степени «шероховатости» фронта используют значения относительной высоты выступов (неровностей) на фронте — h/a , где h — высота максимального выступа по отношению к нижней точке ближайшей впадины. Из проведенных расчетов следует (см. табл. 2), что при детонации криогенной водородокислородной газовзвеси $h/a = 0,16 \div 0,29$. Причем шероховатость фронта ДВ возрастает при уменьшении любого из варьируемых параметров задачи: начального давления p_0 , диаметра каплей d_0 или эквивалентного отношения φ . Измерения неоднородностей детонационного фронта в газовых смесях при различных значениях p_0 [6] дают при повышенных давлениях ($p_0 > 1$ атм) значения $h/a = 0,12 \pm 0,03$. При низких давлениях, когда в сечении канала остается лишь несколько поперечных волн, интенсивность пульсаций фронта увеличивается и отношение h/a может достигать значений $0,2 \div 0,3$. То есть шероховатости фронта ДВ в реагирующих газах и в исследованных численно газовзвесах соизмеримы между собой.

Таким образом, в рамках модели двухфазной двухскоростной среды, проведено числен-

ное исследование ячеистой структуры детонации криогенной водородокислородной газовзвеси $2\varphi\text{H}_2 + \text{O}_2$ в плоском канале при $0,5 \leq \varphi \leq 2$, $d_0 = 25 \div 100$ мкм и $p_0 = 0,5 \div 2$ атм. Определены собственные числа задачи $y_* = a$, при которых гетерогенная ДВ выходит на периодический режим с регулярной ячейкой. Получены количественные данные о размерах ячеек, их форме, а также об относительной высоте неровностей детонационного фронта. Установлен почти линейный рост поперечного размера ячейки при увеличении начального диаметра каплей кислорода. Влияние начального давления на поперечный размер ячейки приближенно описывается зависимостью $a = \text{const} \cdot p_0^{-0,6}$. Обнаружено, что уменьшение доли газообразного водорода в гетерогенной смеси приводит к увеличению степени «шероховатости» детонационного фронта при уменьшении геометрических размеров ячейки. Проведен сравнительный анализ результатов расчета с известными данными для реагирующих газовых смесей.

Выполненное численное исследование является, по-нашему мнению, достаточно убедительным обоснованием необходимости экспериментов в криогенных водородокислородных газовзвесах с целью обнаружения ячеистой детонационных структур.

ЛИТЕРАТУРА

1. Войцеховский Б. В., Митрофанов В. В., Топчийн М. Е. Структура фронта детонации в газах. Новосибирск: Изд-во СО АН СССР, 1963.
2. Васильев А. А., Митрофанов В. В., Топчийн М. Е. Детонационные волны в газах // Физика горения и взрыва. 1987. Т. 23, № 5. С. 109–131.
3. Taki S., Fujiwara T. Numerical simulations of the establishment of gaseous detonation // Dynamics of Shock Waves, Explosions and Detonations / J. R. Bowen et al. (Eds). Progress in Astronautics and Aeronautics; V. 94. New York, 1983. P. 186–200.
4. Oran E. S., Kailasanath K., Guirguis R. H. Numerical simulations of the development and structure of detonations // Dynamics of Explosions / A. L. Kuhl et al. (Eds). Progress in Astronautics and Aeronautics; V. 114. Washington, 1988. P. 155–169.
5. Троцюк А. В. Численное моделирование структуры двумерной газовой детонации смеси $\text{H}_2 - \text{O}_2 - \text{Ar}$ // Физика горения и взрыва. 1999. Т. 35, № 5. С. 93–103.

6. Манжалеу В. И., Митрофанов В. В., Субботин В. А. Измерение неоднородностей детонационного фронта в газовых смесях при повышенных давлениях // Физика горения и взрыва. 1974. Т. 10, № 1. С. 102–110.
7. Dabora E. K., Weinberger L. P. Present status of detonations in two-phase systems // Acta Astronaut. 1974. V. 1, N 3/4. P. 361–372.
8. Борисов А. А., Гельфанд Б. Е. Обзор работ по детонации двухфазных систем // Arch. Termodyn. i Spalan. 1976. V. 7, № 2. P. 273–287.
9. Гельфанд Б. Е. Современное состояние и задачи исследований детонации в системе капли жидкости — газ // Химическая физика процессов горения и взрыва. Детонация. Черногoловка, 1977. С. 28–39.
10. Bowen J. R., Ragland K. W., et al. Heterogenous detonation supported by fuel fogs or films // XIII Symposium (Intern.) on Combustion. Pittsburgh: Combustion Inst., 1971. P. 1131–1139.
11. Papavassiliou J., Makris A., Knystautas R., et al. Measurements of cellular structure in spray detonation // Dynamic Aspects of Explosion Phenomena / A. L. Kuhl et al. (Eds). Progress in Astronautics and Aeronautics; V. 154. Washington, 1993. P. 148–169.
12. Ждан С. А., Прохоров Е. С. Расчет ячеистой структуры детонации распылов в системе H_2-O_2 // Физика горения и взрыва. 2000. Т. 36, № 6. С. 111–118.
13. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. М.: Наука, 1987.
14. Воронин Д. В., Ждан С. А. Об одномерной неустойчивости детонационных волн в распылах // Физика горения и взрыва. 1986. Т. 22, № 4. С. 92–98.
15. Strehlow R. A., Crooker A. J., Cusey R. E. Detonation initiation behind an accelerating shock wave // Combust. Flame. 1967. V. 11, N 4. P. 339–351.

Поступила в редакцию 8/X 2001 г.
