

Влияние диаметра примесных частиц на инициирование газовой детонации ударными волнами

В. П. Ефремов и Л. Р. Обручкова

Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва
125412, Россия

E-mail: o_liliya@ihed.ras.ru

Статья поступила в редакцию 5 июля 2024 г.

Аннотация. Известно, что присутствие инертных частиц в потоке реагирующей газовой среды может, с одной стороны, ослаблять или подавлять детонацию, а с другой стороны, явиться причиной воспламенения, тем самым в ряде случаев ускорив возникновение детонации. В настоящей работе проведен численный анализ влияния диаметра одиночной частицы на инициирование детонации в горючей смеси при ее сжатии ударной волной. Показано, что в исследованном диапазоне диаметров частиц влияние диаметра на инициирование детонации носит пороговый характер. Наличие инертной частицы в потоке ускоряет воспламенение и последующее инициирование детонации в потоке за ударной волной, но только при внесении в поток частицы определенного размера. Частицы меньшего диаметра не оказывают влияния на процесс воспламенения.
<https://doi.org/10.33849/2024104>

1. ВВЕДЕНИЕ

При накоплении горючих газов в рабочих циклах технических систем, используемых в различных отраслях промышленности, существует реальная опасность взрыва и детонации этих газов. Обеспечение взрывобезопасности требует понимания физических механизмов воспламенения и детонации, а также определения количественных характеристик инициирования горения [1]. В обзоре [2] указано, что детонация может возникнуть в ограниченном диапазоне условий (давлений, составов смесей и т.п.). Любое отклонение анализируемой задачи по инициированию детонации от использования одномерной модели стационарной волны [3] может вызвать изменение предельных величин, причем как в сторону замедления, так и в сторону содействия воспламенению, как это показано в [2]. Например, стенки каналов, на которых выполняется условие прилипания, могут способствовать более раннему воспламенению при прохождении ударной волны. Численный расчет, проведенный в работе [4], показал, что с учетом трения на стенках время индукции может оказаться намного меньшим по сравнению со временем индукции в одномерном приближении без трения.

Требования к безопасности технологических процессов так же могут ужесточаться, если в газе присутствует примесь твердотельных частиц, поскольку в этом случае пределы воспламенения могут смещаться, в том числе и в сторону их расширения. Изменение пределов воспламенения и детонации в газообразных смесях, содержащих твердотельные частицы, может быть связано как с процессами испарения или горения этих частиц [5], так и с их газодинамическим воздействием на реагирующий поток, имеющим место даже в случае химически инертных частиц [6].

В работе [7] рассмотрены явления ослабления и подавления детонации в смеси водорода с кислородом, в которой скорость детонации уменьшается за счет добавления в горючую смесь инертных твердых частиц песка. В этой работе было показано, что с уменьшением размера частиц и с ростом их объемной концентрации скорость детонации значительно уменьшается. Рассмотренный эффект является положительным для решения задач безопасности детонационно-опасных объектов.

Роль частиц при инициировании газовой детонации была планомерно обсуждена в работе [8], где представлен обзор экспериментов по ударно-волновому инициированию горения смесей пыль – горючая смесь. Рассмотрено воспламенение частиц пыли в условиях, создаваемых за падающей и отраженной ударными волнами. В частности, актуальность настоящей работы подтверждается указанием, сформулированным в работе [8], на непрозрачность вспыхивающей смеси, что делает невозможным экспериментально прояснить детали процесса одиночного воспламенения частиц.

В экспериментах по изучению воспламенения в машинах быстрого сжатия [9] было обнаружено, что перед воспламенением газовой смеси загорались микрочастицы, случайным образом распределенные в горючей смеси.

В [10] появление областей воспламенения в ударной трубе также происходило в присутствии частиц, специально добавленных экспериментаторами в газовую смесь. Поскольку в потоке вследствие трения или каталитических реакций на поверхности частиц может локально выделяться дополнительная энергия, то таким образом эти частицы могут создавать локальные очаги воспламенения.

В работе [11] было подробно исследовано влияние размера расчетной сетки и кинетики химических реакций на воспламенение в результате падения ударной волны на плохообтекаемое тело. Численно обнаружена стадия, на которой зона реакции заметно приближается к поверхности тела, что приводит к дополнительному выделению тепла от высокотемпературных реакций. При дальнейшем повышении разрешающей способности температурные флуктуации усиливаются и могут заметно возмущать поток.

В работе [12] была предложена математическая модель расчета инициирования детонации частицей малого размера, движущейся в горючих смесях со сверхзвуковой скоростью. В этой работе стационарные и нестационарные расчеты сравнены с экспериментальными данными и сделан вывод о преимуществе для задач с движущейся частицей нестационарных расчетов с динамической адаптацией численных сеток.

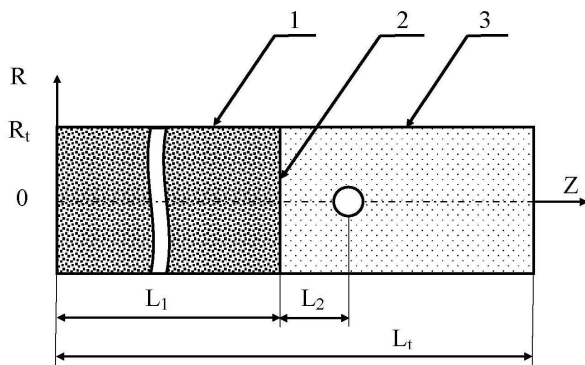


Рисунок 1. Геометрия задачи. 1 — камера высокого давления, 2 — диафрагма, 3 — камера низкого давления.

Ранее в работе [13] были численно исследованы разогревы, вызываемые взвешенными в не реагирующем газе частицами за фронтом ударной волны. Были визуализированы поля температуры, формирующиеся в окрестности частицы. Было показано, что инертная газовая смесь, содержащая одну частицу, нагревается в области между передней поверхностью частицы и фронтом отраженной от нее ударной волны, то есть в области дозвукового течения. Далее нагретый газ попадал в область за частицей. В работе [14] рассмотрение разогревов в окрестности частицы было дополнено моделированием химических реакций в потоке с целью выявить влияние частиц на иницирование газовой детонации. Было численно подтверждено, что частицы играют роль промутеров детонации, и было показано, каким образом происходит воспламенение вблизи частицы.

Настоящая работа является развитием подходов, рассмотренных ранее в [13, 14]. При этом внимание сфокусировано на исследовании явления ускорения воспламенения в присутствии частицы варьируемого размера в газовой смеси заданного состава.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Для того, чтобы достичь ясного понимания влияния отдельной частицы на воспламенение газообразной смеси, мы использовали следующую идеализированную постановку задачи. В работе моделировался процесс воспламенения водород-кислородной смеси в потоке за падающей ударной волной в результате торможения потока помещенной в поток 160-микронной частицей. Геометрия задачи схематически показана на рисунке 1.

Ударная труба была разделена на камеру высокого давления и камеру низкого давления диафрагмой бесконечно малой толщины. Раскрытие диафрагмы происходило мгновенно в момент времени $t = 0$. Газы в обеих частях трубы изначально находились при температуре $T_1 = 300$ К. Камера низкого давления заполнялась водород-кислородной смесью стехиометрического состава, камера высокого давления заполнялась гелием. Давление толкающего газа в камере высокого давления задавалось равным $P_1 = 0.659$ МПа. Давление реагирующей смеси в камере низкого давления: $P_0 = 0.101$ МПа. Эти начальные условия соответствовали формированию

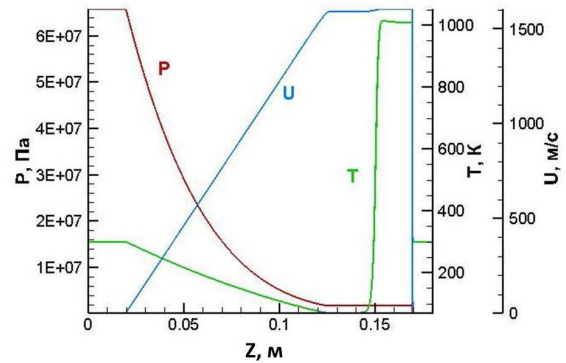


Рисунок 2. Профили давления, температуры и массовой скорости вдоль оси ударной трубы, иллюстрирующие решение задачи о распаде разрыва.

ударной волны с числом Маха 13.65, давление за фронтом ударной волны — 1.66 МПа, температура — 1010 К.

В рамках настоящего исследования задача о воспламенении в потоке за ударной волной, содержащем микрочастицу, решалась для случаев использования сферических частиц различного диаметра: 80, 90, 100, 120, 160 и 320 мкм. Модель ударной трубы не является принципиальной для рассмотрения возможности зажигания газа в условиях сверхзвукового потока, засеянного частицами. Однако, постановка задачи о развитии процесса в ударной трубе позволяет видеть реалистичность достижения исследуемых параметров в лабораторных условиях.

В рамках сформулированной постановки задачи поток ударно нагретого газа формировался в соответствии с решением задачи о распаде произвольного разрыва. Формирование ударной волны при распаде разрыва демонстрируется на рисунке 2. На рисунке 2 показаны характерные профили давления, температуры и скорости потока в момент подхода фронта ударной волны к частичке. Длина трубы составляла 0.18 м, что, как видно по рисунку 2, исключало влияние отраженной от переднего торца трубы ударной волны на процесс воспламенения вблизи инертной частицы. Для выявления особенностей воспламенения и формирования детонации в присутствии 100-микронных частиц рассматривались режимы с воспламенением до прихода контактного разрыва в сечение, в котором была помещена частица.

Выбор радиуса частицы был обусловлен компромиссом между двумя требованиями. С одной стороны, необходимо исследовать влияние на воспламенение и возможность иницирования детонации частиц микронных размеров, характерных для условий, реализуемых в лабораторных экспериментах и в случае развития аварийных ситуаций на промышленных объектах. С другой стороны, уменьшение размера модельной частицы ведет к необходимости увеличения разрешения расчетной сетки и существенному увеличению времени расчета и соответствующих компьютерных ресурсов.

В рамках принятой постановки задачи частица на рассматриваемых временных масштабах считалась неподвижной. Поверхность частицы предполагалась адиабатической. Приближение адиабатичности приемлемо лишь для времен, не превышающих время

температурной релаксации $t_t \approx \frac{R^2}{\chi}$, где χ — коэффициент температуропроводности материала частицы, $\text{м}^2/\text{с}$; R — радиус частицы. Приближение неподвижности частицы допустимо для времен, меньших времени скоростной релаксации $t_U \approx \frac{m}{6\pi\eta R}$, где m — масса частицы, η — динамическая вязкость газа, $\text{Па}\cdot\text{с}$. В рамках рассматриваемой в настоящей работе постановки задачи исследовались процессы, развивающиеся в окрестности частицы на временных масштабах, много меньших обоих времен релаксации. В такой постановке теплопроводность и теплоемкость частицы исключались из рассмотрения. Для проверки сделанных допущений была проведена оценка количества тепла, поглощаемого частицей из потока, чтобы проанализировать насколько изменится картина поля температур при учете указанных свойств частицы. Расчеты, представленные в работе [13], показали, что тепло, поглощенное частицей за время порядка времени релаксации скорости частицы к скорости потока, намного меньше тепла, дополнительно выделенного в потоке за то же время вследствие торможения потока в присутствии частицы, поэтому картина поля температур с учетом теплопроводности и теплоемкости частицы существенно не изменяется в этом интервале времени.

Радиус расчетной области был выбран таким образом, чтобы избежать воздействия косых, отраженных от боковой стенки ударных волн, на процессы, развивающиеся в окрестности частички.

Используемые для решения задачи модельные уравнения и расчетные методики являются традиционными. Для расчетов был использован компьютерный код, широко используемый ранее для решения задач газодинамики горения, например, в [15] и реализующий решение уравнений газодинамики реагирующего газа с применением эйлерово-лагранжева подхода, так же известного как метод “крупных частиц” [16]. В процессе расчетов характеризующие поток физические величины определяются в центрах ячеек эйлеровой сетки, а их изменение за шаг по времени рассчитывается в три этапа. Используемая в данной работе реализация метода “крупных частиц” имеет первый порядок точности по времени и второй порядок точности по пространству [17]. Сама математическая модель представляет из себя стандартную запись балансных уравнений для сжимаемого реагирующего газа с учетом вязкости, теплопроводности и диффузии. Подробная запись уравнений в эйлеровых переменных приведена, например, в работе [18]. Размеры расчетных ячеек варьировались и составляли одну десятую от диаметра частицы. Например, для частицы диаметром 160 мкм ячейка была 16×16 мкм².

Уравнения состояния свежей смеси и продуктов горения задавались на основе таблиц NASA путем интерполяции [19]. Кинетика горения водородно-кислородной смеси описывалась согласно хорошо зарекомендовавшему себя кинетическому механизму [20], с хорошей точностью воспроизводящему как качественные, так и количественные особенности воспламенения и горения водород-кислородной смеси.

Для проверки применимости используемого кода для расчетов полей температур и других параметров потока было проведено тестирование кода на задаче оценки максимального разогрева, получаемого при полной

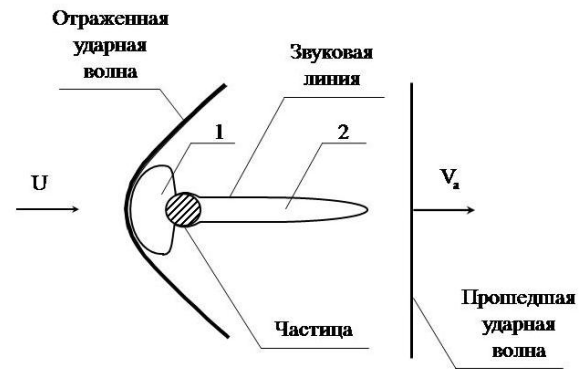


Рисунок 3. Схема взаимодействия сверхзвукового течения газа и частицы за фронтом ударной волны.

остановке потока при натекании на абсолютно жесткую стенку [13]. Полученные результаты показали хорошее соответствие с аналитическими оценками для идеального газа [21]. Численные и аналитические данные совпали. Рассчитанные температуры оказались немного (примерно на 5%) меньше по сравнению с предсказываемыми аналитически, что связано с использованием в расчетах [13] табличного уравнения состояния.

В рамках настоящего исследования за время индукции будем принимать временной интервал между открытием диафрагмы и расчетным временем, когда температура газа в окрестности частицы превысит $1.05 T_2$, где T_2 — температура за фронтом ударной волны. Согласно данным из [22] время индукции в присутствии частицы уменьшается на порядок в сравнении со временем индукции в чистой смеси.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

В простом одномерном расчете воздействия ударной волны на горючий газ воспламенение газа происходит не на фронте ударной волны, а в области контактного разрыва. При рассмотрении распада разрыва в конкретный момент времени после открытия диафрагмы очевидно, что горючий газ вблизи поверхности раздела горячего и толкающего газов находится в сжатом и разогретом состоянии большее время, чем газ непосредственно за фронтом ударной волны. В каждый последующий момент ударная волна захватывает непрореагировавшую смесь, а горючий газ вблизи контактной поверхности подвергается всё более длительному воздействию повышенной температуры. В результате этого экзотермическая стадия реакции наступает вблизи контактной поверхности раньше, чем в других областях ударной трубы, где сжатие в ударной волне происходит позже.

Если в поток помещена частица, то при падении на нее ударной волны от частицы отходит отраженная ударная волна. Между фронтом отраженной ударной волны и поверхностью частицы формируется область, в которой газ дополнительно сжат и разогрет. На рисунке 3 область разогретого и более плотного газа отмечена цифрой 1. Разогрев связан с торможением потока на частице. За частицей также формируется область разогретого газа. Необходимо отметить, что тепло в сверхзвуковом потоке в основном выделяется

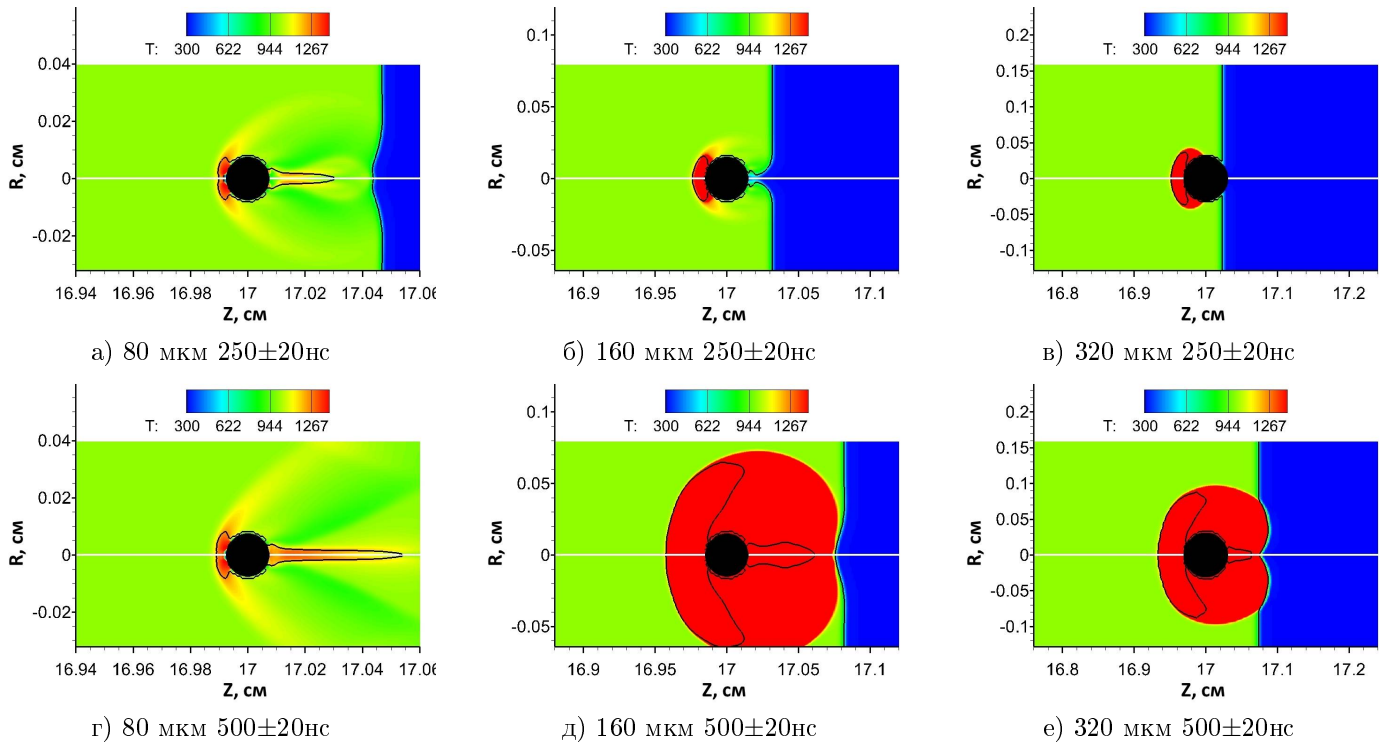


Рисунок 4. Визуализация взаимодействия сверхзвукового течения газа и частицы.

в области замедленного дозвукового течения (на рисунке 3 эта область ограничена звуковой линией, замыкающей внутри себя области 1 и 2 [13]). Звуковая линия показывает место в потоке, где локальное число Маха равно 1. На рисунке 3 V_a обозначает скорость фронта прошедшей ударной волны, U — скорость газа за фронтом прошедшей волны.

Сопоставление расчетов для разных диаметров частицы приведено на рисунке 4 на примере картины поля температуры в два последовательных момента времени Δt после момента соприкосновения ударной волны с частицей. Расчеты производились в двумерной цилиндрической системе координат, в которой координата R — расстояние до точки от оси трубы, координата Z — расстояние до точки от начала трубы. Поля рассчитываемых величин симметричны относительно поворота вокруг оси трубы. На рисунке 4 видно, что при наименьшем в представленных расчетах диаметре 80 мкм детонация не происходит, поскольку при таком размере частицы энерговыделение в ее окрестности недостаточно для инициирования детонации. Для двух других диаметров 160 и 320 мкм поля температуры и других термодинамических величин в окрестностях частицы указывают на воспламенение смеси и распространение детонационной волны.

На рисунке 4 видно, каким образом частица деформирует фронт ударной волны. При дальнейшем прохождении фронта его искажение, вызванное взаимодействием с частицей, сглаживается и нивелируется при удалении на 3–4 диаметра частицы вдоль по потоку. В промежуточных расчетах с диаметром частицы 90, 100 и 120 мкм также произошло инициирование детонации.

Схема стационарного обтекания частицы показана на рисунке 5. Внешняя линия (1) — фронт отраженной от частицы ударной волны, внутренняя линия (2) —

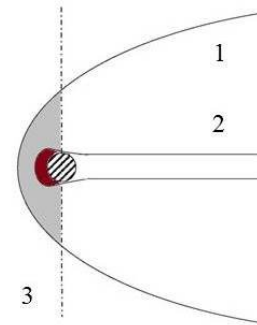


Рисунок 5. Схема стационарного обтекания частичек.

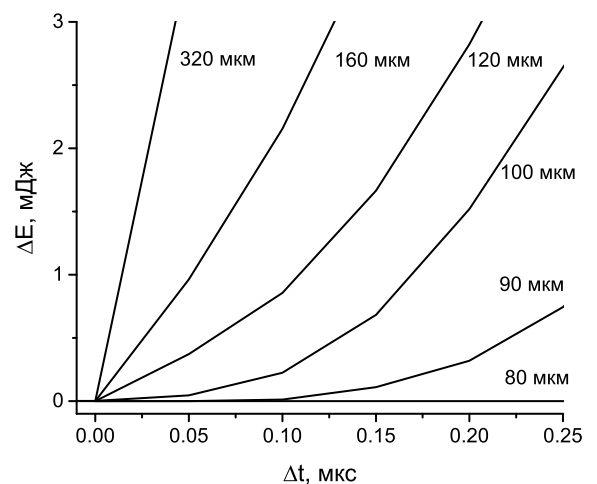


Рисунок 6. Энергии, выделенные в потоке в результате торможения на частицах разного диаметра.

звуковая. Область, отмеченная серым цветом, а именно: от гиперболической поверхности, показанной линией 1, до плоскости, обозначенной штрихпунктирной линией 3 — область, внутри которой формируется очаг воспламенения, то есть выделение энергии за счет торможения именно в этой области определяет условия воспламенения. При этом наибольшую роль играет подобласть, ограниченная звуковой линией и выделенная на рисунке красным цветом, и энергия во всей области торможения потока перед частицей (серая область) отличается от выделившейся в области, ограниченной звуковой линией (красная) не более чем на 10%, что свидетельствует о том, что воспламенение смеси и формирование детонации происходит в области торможения потока вблизи передней поверхности частицы, в дозвуковой области.

Энергии, выделенные в потоке в результате торможения о поверхность частицы, показаны на рисунке 6. По оси абсцисс отложен промежуток времени, проходящий после касания поверхности частицы фронтом ударной волны. На рисунке видно, что имеется некоторый предельный диаметр одиночной частицы, такой, что в случае частицы с диаметром выше предельного в ее окрестности инициируется детонация. В случае диаметра меньшего, чем предельный, газ вблизи частицы прогревается, но вследствие недостаточной для воспламенения энергии детонация не инициируется. В исследованном диапазоне диаметров предельное значение диаметра частицы составило 80 мкм. Характерные значения энергии, определяющие воспламенение, по порядку величины соответствуют известным данным о критических энергиях воспламенения водород-кислородных смесей [23].

4. ВЫВОДЫ

В работе на основе численного анализа задачи об инициировании детонации в потоке реагирующего газа с взвешенной в нем микрочастицей показано, что существенное ускорение воспламенения и инициирования детонации имеет место только в случае относительно крупных частиц (с диаметром более 80 мкм для стехиометрической водород-кислородной смеси). Причем в случае частиц больше предельного размера время индукции от диаметра не зависит.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа была выполнена с использованием суперкомпьютерных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСП РАН).

Авторы признательны И.С. Яковенко за интересные и плодотворные дискуссии и поддержку в расчетах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Maas U and Warnatz J 1988 *Combustion and Flame* **74** 53–69
2. Ciccirelli G and Dorofeev S 2008 *Progress in Energy and Combustion Science* **34** 499–550
3. Зельдович Я Б 1940 *Журн. эксп. и теор. физ.* **10**(5) 542–568
4. Kiverin A D and Yakovenko I S 2018 *Physical Review Fluids* **3** 053201
5. Linteris G T and Babushok V I 2009 *Proceedings of the Combustion Institute* **32** 2535–2542
6. Kaneshige M J and Shepherd J E Oblique detonation stabilized on a hypervelocity projectile *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion* (The Combustion Institute) pp 3015–22
7. Федоров А В, Тропин Д А и Бедарев И А 2010 *Физика горения и взрыва* **46**(3) 103–115
8. Kauffman C W, Sichel M and Wolanski P 1991 Dynamic structure of detonation in gaseous and dispersed media *Fluid mechanics and its applications* vol 5
9. Shushkov S 2012 *Eng. Phys. Thermophys.* **85** 867
10. Hanson R K and Davidson D F August 2–7, 2015 *25th ICDERS* (Leeds UK) p 0260
11. Pavlavanni P K et al 2019 *Proceedings of the Combustion Institute* **37**(3) 3637–3644
12. Bedarev I A, Temerbekov V M and Fedorov A V 2018 Calculation of detonation initiation in a hydrogen/oxygen/argon mixture in by a small-diameter spherical projectile *AIP Conference Proceedings* vol 1939 p 020003
13. Обручкова Л Р, Балдина Э Г и Ефремов В П 2017 *Тензоэнергетика* **3** 77–87
14. Efremov V P, Obruchkova L R, Kiverin A D and Ivanov M F 2018 *J. Phys.: Conf. Ser.* **32** 012073
15. Ivanov M F, Kiverin A D, Yakovenko I S and Liberman M A 2013 *International Journal of Hydrogen Energy* **38**(36) 16427–16440
16. Белоцерковский О М и Давыдов Ю М 1982 *Метод крупных частиц в газовой динамике. Вычислительный эксперимент* (Москва: Наука)
17. Иванов М Ф, Киверин А Д и Пиневиц С Г 2015 *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. “Естественные науки”* **5** 51–68
18. Иванов М Ф, Киверин А Д и Гальбурт В А 2008 *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. “Естественные науки”* **4** 38–45
19. McBride B J, Gordon S and Reno M A 1993 Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species *Technical Memorandum* 4513 (NASA)
20. Keromnes A et al 2013 *Combust. Flame* **160** 995
21. Гейдон А и Герл И 1966 *Ударная труба в химической физике высоких температур* (Москва: Мир)
22. Efremov V P, Obruchkova L R and Kiverin A D 2019 *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences* **6** 67–82
23. Гельфанд Б Е, Попов О Е и Чайванов Б Б 2008 *Водород: параметры горения и взрыва* (Москва: Физматлит)