

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕТЕРОГЕННОЙ ДЕТОНАЦИИ УГОЛЬНОЙ ПЫЛИ В КИСЛОРОДЕ С УЧЕТОМ СТАДИИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ

А. В. Федоров, Т. А. Хмель

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

Предложена сопряженная физико-математическая модель, описывающая процессы воспламенения и детонационного горения газозвеси частиц угольной пыли. Модель основана на представлениях двухскоростного двухтемпературного континуума механики гетерогенных сред с учетом приведенных реакций пиролиза, горения летучих и горения коксового остатка. Верификация проведена с использованием известных экспериментальных данных по зависимостям скорости детонации от начальной концентрации дискретной фазы и времени задержки воспламенения от числа Маха проходящей ударной волны. Анализ процесса воспламенения газозвеси битуминизированного угля в ударных волнах показал, что стадия воспламенения протекает в условиях как температурной, так и скоростной неравновесности. Установлено влияние нагрева частицы за счет температуры торможения на динамику выхода летучих и время задержки воспламенения. Приведены примеры расчета структур течения за ударными и детонационными волнами с учетом стадии воспламенения.

Ключевые слова: воспламенение, детонация, угольная пыль, математическое моделирование.

ВВЕДЕНИЕ

Изучение ударно-волновых процессов в газозвесах частиц угольной пыли представляет как теоретический, так и практический интерес в связи с катастрофическими последствиями взрывных и детонационных явлений в угольных шахтах. Распространение волн детонации в угольных пылевзвесах возможно не только в их смеси с реагирующими газами (например, метановоздушных взвесах), но и в смеси частиц угля с воздухом или кислородом, что подтверждено экспериментально в [1, 2]. В [3] развита физико-математическая модель детонации газозвеси мелких частиц угля в односкоростном двухтемпературном приближении механики гетерогенных сред с учетом процессов выделения летучих, реакций окисления летучих и коксового остатка. Модель соответствует экспериментальным данным [2] по зависимости скорости детонации от начальной концентрации частиц угля в смеси. Анализ структуры стационарных детонационных волн показал значительное различие временных масштабов протекающих в смеси процессов. В частности, процесс пиролиза летучих длится на порядок меньше, чем процесс прогрева частиц до

температуры газа (тепловой релаксации фаз). Последний, в свою очередь, длится много меньше процесса горения коксового остатка угольной частицы. Характерное время горения газобразных углеводородов столь мало, что длительность процесса окисления летучих лимитируется временем их выделения, которое сопоставимо со временем скоростной релаксации в соответствии с оценками, приведенными в работе [3]. Ввиду относительно малой продолжительности процесс скоростной релаксации не принимался во внимание и не анализировался в [3] при моделировании детонации угольной взвеси.

Однако для получения достоверных критериев инициирования детонации необходимо адекватно описывать условия воспламенения частиц. В [3] принимался температурный критерий воспламенения, при котором до достижения частицей некоторой критической температуры реакции считались замороженными. Далее процесс рассматривался как поверхностное горение с выделением тепла в газовой фазе. На стадии задержки воспламенения описание конвективного нагрева частицы проводилось без учета влияния движения частицы относительно газа, т. е. изменения числа Нуссельта. Соответствие данным по задержкам воспламенения обеспечивалось выбором значений температу-

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (номера проектов 03-01-00453, 01-01-00776).

ры воспламенения и скорости выделения летучих.

Известные из экспериментов значения времен задержки воспламенения в проходящих ударных волнах (УВ) [4, 5] для частиц диаметром до 70 мкм сравнимы с характерными временами скоростной релаксации. Это указывает на то, что стадия воспламенения частиц в детонационной волне полностью протекает в неравновесной по скоростям смеси. При этом условия воспламенения отличаются не только от статических условий медленного нагрева, но и от условий за отраженными УВ. Значительное (на порядки) уменьшение времени задержки воспламенения за проходящими УВ относительно воспламенения в отраженных УВ экспериментально установлено в [6, 7] для угольной пыли дисперсностью $1 \div 40$ мкм. Физические причины этого различия заключаются в том, что обдув частицы потоком влияет на тепловую динамику частицы как через интенсификацию конвективного теплообмена (увеличение числа Нуссельта), так и вследствие повышения температуры газа в пограничном слое частицы за счет торможения потока. Оценки для степени нагрева несущей фазы за счет торможения потока в условиях стесненности в плотных облаках пыли получены в [7], где ответственным за аномальное уменьшение времени задержки воспламенения считается именно этот фактор. Обдув частицы влияет также на условия сгорания летучих, которое происходит в этом случае за пределами объема прилегающей к частице «приведенной» пленки [8], ограничивающей перемешивание летучих с газом в статических условиях и за отраженными УВ. Это, с одной стороны, приводит к снижению потока тепла от сгорания летучих к частице, с другой стороны, продукты сгорания сносятся потоком и не препятствуют притоку окислителя к поверхности частицы.

Таким образом, при исследовании начальной стадии нагрева твердой фазы и определении условий воспламенения частиц в детонационных волнах (как и за проходящими УВ) необходимо принимать во внимание условия скоростной неравновесности. Поэтому для описания детонационных процессов в газозвеси частиц угольной пыли с учетом стадии воспламенения необходимо развитие физико-математической модели с привлечением двухскоростного приближения механики реагирующих гетерогенных сред.

СОПРЯЖЕННАЯ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И ДЕТОНАЦИИ ГАЗОВЗВЕСИ УГОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ

Система основных уравнений, описывающих течение за фронтом стационарной ударной (детонационной) волны в газозвеси частиц угольной пыли в сопутствующей системе координат, включает алгебраические уравнения, выражающие законы сохранения:

$$\rho_1 u_1 + (\rho_2 + \rho_3) u_2 = C_1,$$

$$p + \rho_1 u_1^2 + (\rho_2 + \rho_3) u_2^2 = C_2, \quad (1)$$

$$E_1 \rho_1 u_1 + p u_1 + E_2 \rho_2 u_2 + E_3 \rho_3 u_2 = C_3,$$

обыкновенные дифференциальные уравнения, описывающие кинетические процессы, скоростную релаксацию и теплообмен:

$$\frac{d\rho_2 u_2}{dx} = -J_2, \quad \frac{d\rho_3 u_2}{dx} = -J_3,$$

$$(\rho_2 + \rho_3) u_2 \frac{du_2}{dx} = f, \quad (2)$$

$$(\rho_2 c_2 + \rho_3 c_3) u_2 \frac{dT_2}{dx} = q + (1 - \theta_3) J_3 Q_3 - J_2 Q_{dev} + (1 - \theta_2) \xi_{12}^* J_2 Q_{12},$$

уравнения состояния:

$$E_1 = \frac{u_1^2}{2} + e_1, \quad E_2 = \frac{u_2^2}{2} + c_3 T_2 + \xi_{12}^* Q_{12} - Q_{dev},$$

$$E_3 = \frac{u_2^2}{2} + c_3 T_2 + Q_3, \quad (3)$$

$$p = \rho_{11}(\gamma - 1)e_1, \quad \gamma = \gamma(e_1), \quad T_1 = \frac{(\gamma - 1)e_1}{R},$$

и замыкающие соотношения, представляющие выражения для силы межфазного взаимодействия f и теплообмена q :

$$f = \frac{3m_2 \rho_{11}}{4d} c_D |u_1 - u_2| (u_1 - u_2),$$

$$q = \frac{6m_2 \lambda_1}{d^2} \text{Nu}(T_f - T_2),$$

$$c_D(\text{Re}, M_{12}) = \left(1 + \exp\left(-\frac{0,43}{M_{12}^{4,67}}\right)\right) \times$$

$$\times \left(0,38 + \frac{24}{\text{Re}} + \frac{4}{\sqrt{\text{Re}}}\right), \text{Re} = \frac{\rho_{11}d|u_1 - u_2|}{\mu},$$

$$M_{12} = \frac{|u_1 - u_2|\sqrt{\rho_{11}}}{\sqrt{\gamma p}},$$

$$\rho_{11} = \frac{\rho_1}{1 - m_2}, \quad m_2 = \frac{\rho_2 + \rho_3}{\rho_{23}},$$

$$\text{Nu} = 2 + 0,6\text{Re}^{1/2}\text{Pr}^{1/3}, \quad (4)$$

$$T_f = T_1[1 + 0,5\text{Pr}^{1/3}(\gamma - 1)M_{12}^2].$$

Уравнения (1)–(4) являются обобщением математической модели [3], содержащей минимальное число химических реакций, на случай $u_1 \neq u_2$. (Детальная модель горения угольной пыли в ударных и детонационных волнах представлена в [9].) Здесь $\rho_i, u_i, T_i, c_i, e_i, E_i$ — соответственно средние плотности, скорости, температуры, теплоемкости, внутренние и полные энергии компонентов, p — давление, ρ_{11}, ρ_{23} — истинные плотности газа и частицы, m_2 — объемная концентрация дисперсной фазы, d — диаметр частиц, λ_1, μ — теплопроводность и вязкость газа, M_{12}, Re — числа Маха и Рейнольдса относительного движения частиц, c_D — коэффициент сопротивления, Nu и Pr — числа Нуссельта и Прандтля, T_f — температура торможения, γ — показатель адиабаты газа. Индексы: 1 — газ, 2 — твердые летучие в связанном состоянии в частице, 3 — коксовая составляющая частицы. Массовые концентрации компонентов определяются как $\xi_i = \rho_i/\rho$, где $\rho = \rho_1 + \rho_2 + \rho_3$.

Анализ зоны воспламенения проводится для широкого класса волн, включающих как волны детонации (нормальные и пересжатые), так и затухающие (или ускоряющиеся) нестационарные волны. В силу того, что характерные времена задержки воспламенения много меньше характерного времени изменения скорости лидирующей волны, на этом этапе справедливо квазистационарное приближение, при котором скорость u_0 считается заданной и постоянной. В сопряженной модели воспламенения и детонации скорость нормальной детонации Чепмена — Жуге u_0 зависит от концентрации частиц и определяется из условия

$M_e = u_1/c_e \rightarrow 1$ при $x \rightarrow \infty$ [3], где c_e — равновесная скорость звука в смеси.

Константы C_1, C_2, C_3 в (1) определяются по начальному состоянию смеси и скорости фронта u_0 .

Начальные условия для системы (1)–(4) соответствуют состоянию на замороженной УВ, которое определяется из (1) и параметров начального состояния $\rho_2 = \rho_{20}, \rho_3 = \rho_{30}, u_2 = u_0, T_2 = T_0$. Аналогично из (1) и условий $\rho_2 = 0, \rho_3 = \rho_k, u_2 = u_1, T_2 = T_1$ находится конечное равновесное состояние.

Анализ данных по кинетике сгорания летучих [10] и выводов работы [3] позволяет упростить модель, пренебрегая присутствием горючей части летучих в газовой фазе, так как сгорание газообразных летучих протекает на порядки быстрее их выделения. Величины J_2, J_3 в (2) определяют изменение массы связанных летучих в частице при их переходе в газообразное состояние и изменение массы коксовой составляющей частицы при окислении углерода. Выражения для J_2, J_3 различаются на стадиях воспламенения и горения. В описании динамики нагрева частиц (2) Q_{dev}, Q_{12}, Q_3 — теплота пиролиза, горения летучих и горения кокса соответственно, ξ_{12}^* — константа, определяющая долю горючих летучих в их общей массе. Принимается, что тепло химических реакций окисления летучих и углерода распределяется между газовой и твердой фазами в соответствии с аккомодационными коэффициентами θ_2, θ_3 , а тепло, затрачиваемое на разложение (пиролиз) летучих, берется из частицы.

В модели предполагается, что термодинамические свойства смеси газов за УВ и продуктов детонации сходны со свойствами исходного газа. Допустимость такого предположения, позволяющего существенно упростить рассмотрение газовой фазы, не выделяя каждый из компонентов (как, например, в [9]), основана на следующем положении. Концентрация выделившихся летучих, состоящих в основном из горючих углеводородов, очень мала ввиду их быстрого сгорания. Определяющими термодинамические свойства газа компонентами являются кислород, оксид углерода, диоксид углерода и в небольшом количестве водяной пар. При значении начальной концентрации твердой фазы, находящемся между первой точкой стехиометрии (по CO_2) и второй (по CO), детонационное горение смеси угольной пыли с кислородом происходит с образова-

нием примерно равных количеств оксида и диоксида углерода. Нетрудно оценить, что молекулярная масса смеси, состоящей из указанных компонентов в соотношении $\xi_{\text{O}_2} = \alpha$, $\xi_{\text{CO}_2} = 0,5(1 - \alpha)$, $\xi_{\text{CO}} = 0,4(1 - \alpha)$, $\xi_{\text{H}_2\text{O}} = 0,1(1 - \alpha)$, $0 < \alpha < 1$, совпадает с молекулярной массой кислорода. Поскольку теплоемкости кислорода, оксида углерода и углекислого газа в широком диапазоне температур близки, термодинамические свойства смеси мало отличаются от свойств кислорода.

В уравнении состояния газа (3) учитывается изменение показателя адиабаты газа на УВ. Зависимость показателя адиабаты кислорода от внутренней энергии описывается уравнением типа Коренькова — Охитина [11]

$$\gamma = \begin{cases} \gamma_0 - \alpha_1(e_1/e_*)^\beta & \text{при } e_1 \leq e_*, \\ \gamma_\infty + (\gamma_* - \gamma_\infty) \exp(\alpha_2(1 - e_1/e_*)) & \text{при } e_1 > e_* \end{cases} \quad (5)$$

с константами, определенными в [3]: $e_* = 0,7$ МДж/кг, $\gamma_0 = 1,41$, $\gamma_\infty = 1,234$, $\gamma_* = 1,32$, $\alpha_1 = 0,09$, $\alpha_2 = 0,32$, $\beta = 1,5$.

В (4) учитываются сила сопротивления частицы в потоке газа [12] и температура торможения потока в пограничном слое на поверхности частицы T_f в условиях скоростной неравновесности [13]. Принимается во внимание также зависимость теплопроводности газа от температуры $\lambda_1(T) = \lambda_1(300)(T/300)^{0,5}$.

Замыкающие соотношения для уравнений изменения массы компонентов определяются кинетикой реакций выделения летучих и окисления коксового остатка, которые в соответствии с известными данными имеют вид

$$\tilde{J}_2(T) = \rho_2 \left(\frac{1}{\tau_{21}} \exp\left(-\frac{E_{a21}}{RT}\right) + \frac{1}{\tau_{22}} \exp\left(-\frac{E_{a22}}{RT}\right) \right), \quad (6)$$

$$\tilde{J}_3(T) = \frac{(\rho_3 - \rho_k)}{\tau_3} \exp\left(-\frac{E_{a3}}{RT}\right). \quad (7)$$

Здесь уравнение для \tilde{J}_2 , характеризующее кинетику выделения летучих распыленного битуминизированного угля в условиях быстрого нагрева (применительно к углю Питтсбургского пласта), принято в соответствии с [14]. Процесс окисления кокса описывается уравнением типа Аррениуса для \tilde{J}_3 с учетом неполноты сгорания, которая может быть связана как с содержанием несгораемых шлаков (зола), так и

с недостатком окислителя при концентрациях угольной пыли, превышающих стехиометрический предел [3]. В (7) τ_{21} , τ_{22} , τ_3 — константы, которые вместе с энергиями активации E_{a21} , E_{a22} , E_{a3} характеризуют времена протекания процессов выделения летучих и горения коксового остатка, ρ_k отвечает несгораемому остатку. Входящие в (7) константы принимались в соответствии с данными [14–16].

Из оценок следует, что процесс поверхностного горения угольной частицы по длительности более чем в 100 раз превышает стадию воспламенения и в основном протекает в условиях скоростной и температурной равновесности фаз. Поэтому аналогично [3] принимается, что скорость реакции горения определяется температурой частицы T_2 : $J_2 = \tilde{J}_2(T_2)$, $J_3 = \tilde{J}_3(T_2)$. На стадии горения коксового остатка принимается также, что тепло горения летучих полностью выделяется в газовой фазе ($\theta_2 = 1$), а тепло поверхностной реакции горения частицы распределяется между фазами в равных долях ($\theta_3 = 0,5$). Заметим, что коэффициент θ_3 не играет здесь большой роли в силу того, что характерное время горения существенно больше характерного времени установления теплового равновесия фаз.

При описании стадии воспламенения необходимо принимать во внимание неоднородное распределение температуры по частице. Наблюдаемые в экспериментах [5] задержки воспламенения угольных частиц размером более 50 мкм в проходящих УВ не превышают 0,1 мс, что меньше характерного времени полного прогрева такой частицы даже в условиях ускоренного обдувом конвективного теплообмена. Таким образом, определяющие воспламенение процессы протекают на более нагретой поверхности частицы. Учет температурной неоднородности позволил авторам [5] получить согласование расчетных и экспериментальных результатов по воспламенению одиночной частицы угля. Для взвеси в рамках двухтемпературного континуума механики гетерогенных сред учесть полное распределение температуры внутри частиц затруднительно, поэтому в качестве приближения принимается ступенчатое распределение температуры по частице. Предполагается, что тонкий поверхностный слой частицы характеризуется температурой T_f , а остальной объем частицы имеет температуру T_2 . Тогда на стадии воспламенения

$$J_2 = k_f \tilde{J}_2(T_f) + (1 - k_f) \tilde{J}_2(T_2), \quad (8)$$

$$J_3 = k_{por} [k_f \tilde{J}_3(T_f) + (1 - k_f) \tilde{J}_3(T_2)],$$

где k_f выражает относительную массу слоя, а k_{por} — коэффициент, позволяющий учесть протекание реакции окисления углерода на внутренней поверхности пор.

Рассматривается два подхода для определения k_f . В первом случае принимается зависимость $k_f(M_0)$, где M_0 — число Маха ударной волны. Второе приближение состоит в представлении k_f в виде зависимости $k_f(T_1^*)$, где T_1^* — некоторая характерная температура, конкретизация которой будет дана ниже. Аккомодационные коэффициенты на стадии воспламенения $\theta_2 = 0,5$, $\theta_3 = 0$ соответствуют тому, что тепло реакции окисления углерода в порах выделяется в частице, а тепло реакции окисления летучих распределяется в равных долях между газом и частицей.

АНАЛИЗ ПРОЦЕССА ВОСПЛАМЕНЕНИЯ В ГАЗОВЗВЕСИ ЧАСТИЦ БИТУМИНИЗИРОВАННОГО УГЛЯ

Расчеты проводились для тех же частиц угля (размером 50 мкм с содержанием летучих 32 % и золы 10 %), детонация взвеси которых исследовалась экспериментально в [2]. Данные по воспламенению подобных по размеру (53 ÷ 74 мкм) и содержанию летучих частиц битуминизированного угля Питтсбургского пласта приведены в [5]. Кинетика выделения летучих и горения угля данной марки достаточно хорошо изучена [14–16]. В соответствии с этими данными принимались следующие константы реакций: $E_{a21} = 17,6$ ккал/моль (73,6 кДж/моль), $\tau_{21} = 0,0027$ мс, $E_{a22} = 60$ ккал/моль (251 кДж/моль), $\tau_{22} = 0,68 \cdot 10^{-10}$ мс [14], $E_{a3} = 34$ ккал/моль (142,5 кДж/моль) [15, 16]. Скорость горения питтсбургского угля в кислороде слабо зависит от давления газа (пропорциональна p^n , $n = 0,17$ [15], в настоящей работе принимается $n = 0$). Предэкспоненциальный множитель реакции, определяющий скорость поверхностного горения, приведен в [16] для частиц размером 16 мкм. В [15] из сравнения данных по горению частиц различных размеров определена зависимость скорости поверхностного горения от диаметра для частиц питтсбургского угля в виде степенного закона с

показателем $-0,4$. Соответственно для частиц размером 50 мкм определяется $\tau_3 = 0,00445$ мс. При этом расчетное время горения частицы в детонационной волне согласуется с данными [3], полученными при скорости горения, принятой в соответствии с [17].

Экспериментальные данные [5] приведены в виде зависимости периода задержки воспламенения от числа Маха УВ (либо температуры газа на фронте). Задержкой воспламенения считалось время от момента прохождения фронта УВ до момента появления видимого свечения пламени. Здесь измеряемой характеристикой являлась скорость фронта проходящей УВ, а температура газа определялась по известным соотношениям на ударном скачке. Соответствующие [5] данные по числам Маха, скоростям УВ и температурам газа содержатся в трех первых графах таблицы. Приведенные величины удовлетворяют (1), (3) при $\rho_{30} = 0$ и $\gamma = 1,4$. Значения температуры газа, вычисленные с учетом зависимости (5) и температуры торможения T_f (4) при различных числах Маха падающей УВ, даны в двух следующих графах таблицы. В последней графе представлены значения времени задержки воспламенения τ_{ign} , полученные из обработки результатов экспериментов в виде прямой в полулогарифмическом масштабе. Отмеченные звездочками данные соответствуют экстраполяции за пределы рассматриваемых в [5] значений числа Маха.

Как видно из анализа приведенных в таблице данных, в диапазоне рассмотренных значений числа Маха нагрев газа вблизи поверхности частицы за счет торможения потока в пограничном слое существенно превышает разницу температур, связанную с учетом изменения γ на УВ.

В двухфазной смеси изменение температуры газа T_1 в зоне скоростной релаксации за фронтом УВ зависит также от концентрации частиц. Эффект стеснения потока в присутствии твердой фазы и его влияние на задержки воспламенения частиц обсуждаются в [7] для плотных облаков пыли. В диапазоне рассматриваемых значений массовой концентрации объем, занятый частицами, мал, что позволяет пренебречь им при определении параметров газа. Однако существенным является рост температуры газа за счет тепла, выделяемого при торможении частиц в потоке за УВ. Сравнительные оценки величин, вносящих вклад в

Экспериментальные и расчетные значения
температуры газа и задержек воспламенения

M_0	u_0 , км/с	T_1 , К		T_f , К	τ_{ign} , мкс [5]
		[5]	с учетом (5)		
4,0	1,32	1 194	1 029	1 511	80*
4,15	1,37	1 266	1 085	1 607	60
4,22	1,39	1 300	1 111	1 652	50
4,32	1,43	1 341	1 150	1 718	40
4,5	1,48	1 439	1 220	1 838	30
4,58	1,51	1 475	1 252	1 893	25
4,69	1,55	1 536	1 297	1 971	20
4,87	1,60	1 639	1 363	2 084	15*

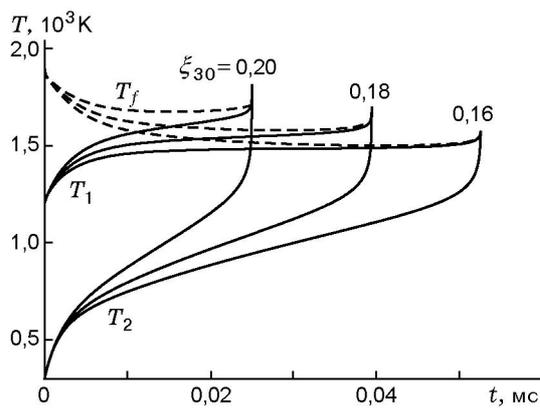


Рис. 1. Зависимость температур фаз и температуры торможения от времени за фронтом УВ

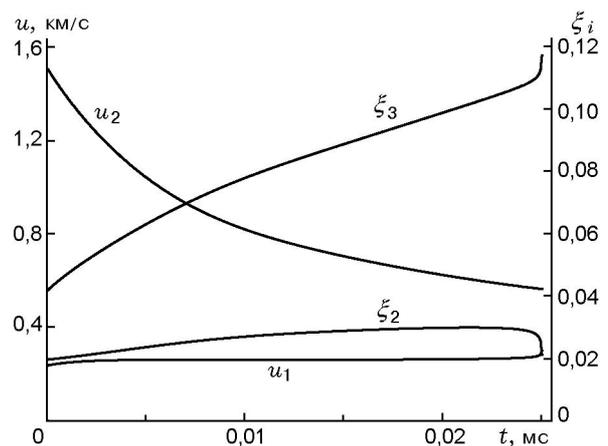


Рис. 2. Профили параметров смеси на стадии задержки воспламенения за проходящей УВ

тепловую динамику двухфазной смеси за УВ, приведены в [18] на примере детонационного течения алюминия в кислороде. Показано, что непосредственно за фронтом УВ преобладает тепловой вклад в газовую фазу от торможения частиц, а по истечении времени скоростной релаксации доминирует передача тепла от газа к частицам за счет конвективного теплообмена.

В условиях экспериментов [5] УВ проходит практически по однородной взвеси угольной пыли, хотя данных по концентрации частиц там не приведено. В силу этого расчеты выполнялись для нескольких значений ξ_{30} , а для верификации модели в соответствии с данными [5] принималось $\xi_{30} = 0,2$. Варьирование коэффициента k_{por} от 1 до 3 600 показало его малое влияние на условия воспламенения. Это свидетельствует, что определяющим в вос-

пламенении является кинетика выделения и горения летучих. Приведенные ниже результаты получены (если не оговорено) при $k_{por} = 1$.

Данные расчетов в первом приближении, когда коэффициент, характеризующий объем поверхностного слоя, считается зависящим только от числа Маха УВ, приведены на рис. 1, 2. Зависимость $k_f(M_0)$ определялась из наилучшего согласования расчетных и экспериментальных данных при $\xi_{30} = 0,2$ и использовалась далее при варьировании концентрации частиц. На рис. 1 представлена картина динамики нагрева частиц питтсбургского угля за проходящей УВ ($M_0 = 4,58$; $u_0 = 1,511$ км/с) в виде профилей температур газа и частиц и температуры торможения. Здесь и далее временная координата задается формулой $t = x/u_0$. Видно, что первоначально за

прошедшей УВ рост температуры частиц обусловлен конвективным теплообменом, определяемым высоким значением температуры торможения газа, которое, в свою очередь, связано с различием скоростей фаз на фронте УВ. По мере скоростной релаксации температура газа вне пограничного слоя и температура торможения сближаются. Влияние концентрации твердой фазы на параметры газа проявляется в увеличении температуры газа за счет тепла, выделяющегося при торможении частиц в потоке, которого тем больше, чем выше концентрация частиц. Соответственно, при большей концентрации частиц большей остается и температура торможения. Все это сказывается на кинетике физико-химических процессов в поверхностном слое частицы. Скорость протекания процессов внутри частицы определяется температурой твердой фазы, которая также коррелирует с температурой газа и температурой торможения. Как видно на рис. 1 и 2, здесь имеет место срыв теплового равновесия, проявляющийся в неограниченном росте температуры частицы за конечное время.

Механизм воспламенения выявляется из анализа динамики изменения массовых концентраций компонентов за УВ. На рис. 2 приведены скорости фаз u_1 , u_2 и концентрации компонентов ξ_2 , ξ_3 при $M_0 = 4,58$, $\xi_{30} = 0,2$. Первоначальный рост относительной массовой концентрации летучих и коксового остатка связан с процессом скоростной релаксации фаз, при котором имеет место увеличение плотности твердой фазы за УВ (формирование так называемого ρ -слоя, отмеченного также в [18]). Интенсификация процессов выделения летучих и окисления кокса при увеличении температуры частиц ведет к изменению концентраций компонентов уже за счет химических превращений. С ростом температуры процесс выделения (и горения) летучих протекает существенно быстрее, чем окисление кокса. В силу этого данный процесс и является определяющим в динамике нагрева и воспламенении частицы. Из рис. 2 видно, что на участке $0,024 \div 0,025$ мс концентрация летучих в частице (и в смеси) резко уменьшается и, соответственно, увеличивается относительная доля коксового остатка. Таким образом, срыв теплового равновесия происходит за счет ускорения реакции выхода летучих и нагрева частицы при их сгорании вблизи поверхности. Данный вывод согласуется с результатами [6, 7], указывающими на определя-

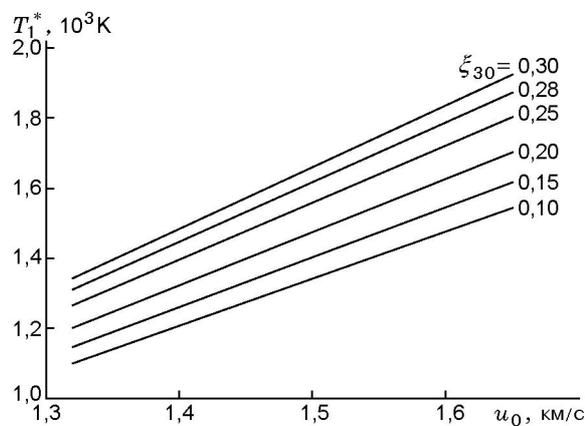


Рис. 3. Зависимость характерной температуры нагрева частиц от скорости УВ и концентрации частиц

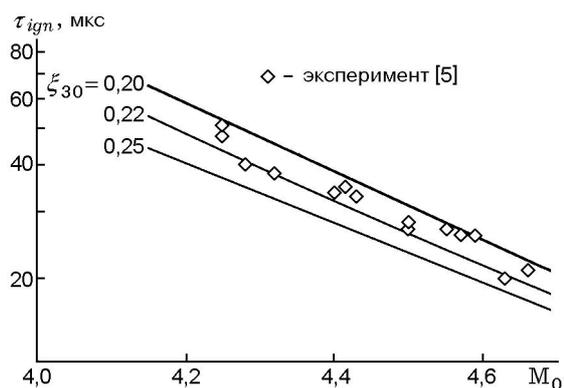


Рис. 4. Экспериментальные [5] и расчетные данные времени задержки воспламенения частиц питтсбургского угля

ющую роль летучих в воспламенении частиц угольной пыли за УВ. В соответствии с классификацией воспламенения угольных частиц [19], для рассмотренного здесь битуминизированного угля имеет место смешанный (гомогенно-гетерогенный) тип воспламенения.

Второе приближение состоит в определении зависимости коэффициента k_f от амплитуды УВ и концентрации частиц в виде $k_f(T_1^*(M_0, \xi_0))$. Здесь T_1^* — некоторая характерная температура за УВ, которая определяется как максимальная температура газа в зоне скоростной релаксации инертной смеси при заданной концентрации. Предельное значение этой температуры при стремлении к нулю характерного времени скоростной релаксации можно получить из условий на замороженной УВ в равновесной по скоростям модели [3].

Расчетная зависимость $T_1^*(M_0, \xi_{30})$, характеризующая степень нагрева газа при вхождении УВ в смесь при реальных параметрах процесса, показана на рис. 3. Из расчетов определена функция $k_f(T_1^*)$, обеспечивающая согласование с данными [5] по временам задержки воспламенения при $\xi_{30} = 0,2$. Эта зависимость аппроксимируется зависимостью $k_f(T_1^*) = 1,948 \times 10^{-8} \exp(19\,203/T_1^*)$, которая используется далее при варьировании ξ_{30} , в том числе и в расчетах процессов детонации. Результаты расчета времен задержки воспламенения в зависимости от числа Маха УВ для различных значений ξ_{30} приведены на рис. 4. Как видно, результаты с большой точностью представляются в полупологарифмическом масштабе прямыми линиями, что отражает аррениусовский характер процессов, определяющих стадию воспламенения [5]. Отметим, что в рамках второго приближения влияние концентрации частиц на положение срыва теплового равновесия меньше, чем в рамках первого, что подтверждается данными рис. 4. При изменении ξ_{30} в диапазоне $0,2 \div 0,22$ результаты остаются в пределах разброса экспериментальных данных.

Важным моментом в описании поведения частиц за ударными и детонационными волнами является определение момента перехода от воспламенения к горению. На стадии воспламенения принимается, что тепло реакции окисления летучих в порах и вблизи поверхностного слоя распределяется между фазами в равных долях. Интенсификация горения выделившихся летучих (появление пламени, регистрируемое в экспериментах) переводит процесс в фазу, когда тепло этой реакции выделяется полностью в газе. При математическом моделировании воспламенения характеризуется срывом теплового равновесия и последующим бесконечным ростом температуры, который в физическом процессе невозможен. При больших температурах в рамках модели неприменимы как принятые кинетические уравнения (определенные вместе с входящими константами для ограниченного диапазона температур), так и уравнения состояния газа. Еще одна особенность состоит в том, что выделение летучих из поверхностного слоя, определяющего динамику нагрева частицы на начальной стадии, ограничено их содержанием в этом слое. Далее процесс протекает с вовлечением более глубоких слоев частицы. Поэтому по мере перехода к стадии горения реакция выделения летучих в большей степени опреде-

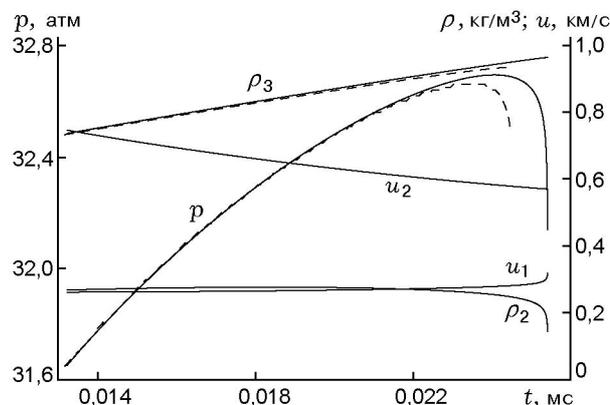


Рис. 5. Динамика параметров смеси в окрестности срыва теплового равновесия ($\xi_{30} = 0,2$, $M_0 = 4,58$):

сплошные линии — $k_{por} = 1$, штриховые — $k_{por} = 3\,600$

ляется температурой частицы T_2 , чем температурой торможения T_f . Таким образом, для корректного описания процесса воспламенения и горения в целом своевременный переход от одной модели к другой имеет большое значение.

В математическом моделировании критерии перехода, основанные на ограничениях по температурам или по скорости изменения параметров, являются в определенной мере искусственными, так как требуют обоснования выбора критических значений параметров. Использование полуэмпирического критерия в виде аппроксимационных зависимостей времени задержки воспламенения, полученных из обработки данных экспериментов, ограничено тем, что при проведении расчетов необходимо предотвратить возможный неограниченный рост температуры до достижения точки перехода.

В настоящей работе принимается следующий критерий перехода, основанный на анализе динамики двухфазной смеси. Как видно из рис. 2, стадия воспламенения полностью протекает в условиях скоростной неравновесности, при этом характер изменения скоростей фаз монотонный. Изменение давления газа и плотности твердой фазы в период интенсификации выделения и горения летучих показано на рис. 5. Близость кривых, соответствующих $k_{por} = 1$ и $k_{por} = 3\,600$ [5], и незначительное смещение точки срыва еще раз подтверждают второстепенную роль реакции окисления кокса в процессе воспламенения. Видно, что давление газа изменяется немонотонно. За точкой

максимума наблюдается резкое падение давления, которое вместе с бесконечным ростом температуры газа сопровождается отсутствующее в реальном процессе неограниченное ускорение выделения (и горения) летучих. Промежуток от указанной точки экстремума до предельного значения существования решения в рамках модели воспламенения невелик (5 % от всего периода задержки воспламенения). В силу этого при описании газозвеси частиц угольной пыли в проходящих ударных и детонационных волнах точка максимума давления условно считается точкой срыва теплового равновесия или точкой перехода от стадии воспламенения к стадии горения.

ВОСПЛАМЕНЕНИЕ И ГОРЕНИЕ ГАЗОВЗВЕСИ БИТУМИНИЗИРОВАННОГО УГЛЯ В ДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛНАХ

Расчет структуры течения газозвеси частиц угольной пыли в детонационных волнах проводился в рамках описанной выше сопряженной модели.

Стационарная детонация смесей газа и реагирующих частиц характеризуется определенной зависимостью скорости детонации от состава смеси (начальной концентрации частиц). Для взвесей частиц угольной пыли в кислороде эта зависимость, полученная из обработки экспериментальных данных [2] (в том числе для битуминизированного угля с содержанием летучих 32 % и размером частиц 54 мкм), представлена в [3], где использована для верификации модели, основанной на односкоростном двухтемпературном приближении механики гетерогенных сред. Модель детонации, принятая в настоящей работе, является развитием и обобщением модели [3] на случай двухскоростного приближения, при этом равновесные соотношения, определяющие зависимость скорости детонации от концентрации, остаются в силе.

В режиме Чепмена — Жуге скорость смеси в конечном состоянии равна равновесной скорости звука. Кроме равновесной и замороженной скоростей звука (скорости распространения малых возмущений в газовой фазе) в неравновесном течении двухфазной смеси определяются промежуточные скорости звука. Выражения для равновесной, замороженной, а также равновесной по скоростям и замороженной по температурам скорости звука, равной

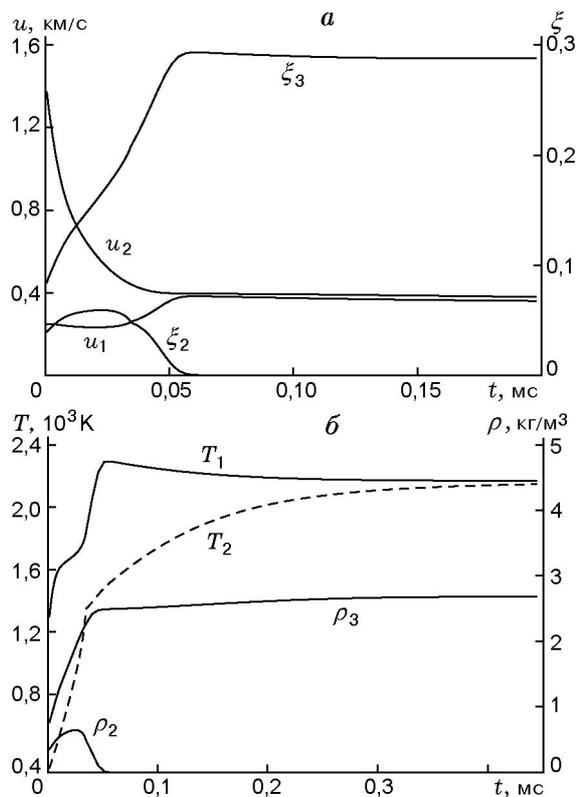


Рис. 6. Структура течения в волне детонации (зона воспламенения и начало зоны горения), $\xi_{30} = 0,3$ ($u_0 = 1,45$ км/с)

замороженной скорости звука в односкоростной модели, с учетом зависимости $\gamma(e_1)$ имеют вид

$$c_e^2 = \gamma_e p / \rho, \quad \rho = \rho_1 + \rho_2 + \rho_3,$$

$$\gamma_e = \frac{1}{R\xi_1 + (\gamma - 1)\varpi + \varpi e_1 (d\gamma/de_1)} \times$$

$$\times R\gamma\xi_1 + (\gamma - 1)\varpi + (\varpi + \xi_1 R)e_1 (d\gamma/de_1),$$

$$\varpi = \xi_2 c_2 + \xi_3 c_3, \tag{9}$$

$$c_f^2 = \left(\gamma + e_1 \frac{d\gamma}{de_1} \right) \frac{p}{\rho_1}, \quad c_{e,f}^2 = \left(\gamma + e_1 \frac{d\gamma}{de_1} \right) \frac{p}{\rho}.$$

Нетрудно убедиться, что $c_e < c_{e,f} < c_f$, как и в случае $\gamma = \text{const}$ ($d\gamma/de_1 = 0$).

Примеры стационарных детонационных структур приведены на рис. 6 и 7. Точка воспламенения характеризуется изломом в распределении температуры частиц на рис. 6, б, отражающем переход от реакции воспламенения

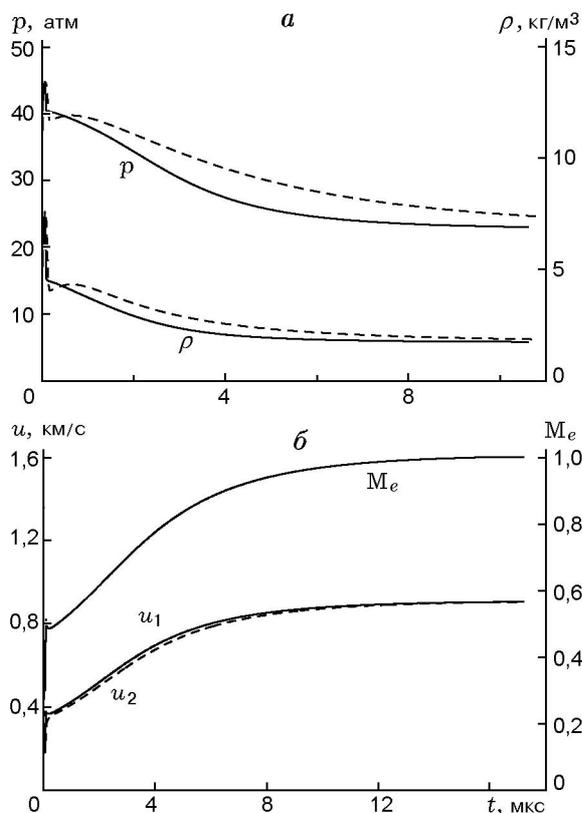


Рис. 7. Выход на равновесное состояние в волне детонации, $\xi_{30} = 0,2$ ($u_0 = 1,67$ км/с):

сплошные линии — модель авторов, штриховые — односкоростное приближение [3]

к реакции горения с выделением тепла химических реакций в газовой фазе. Сопоставление рис. 6, а и 6, б подтверждает, что стадия воспламенения полностью протекает в условиях существенного различия температур и скоростей фаз. Увеличение относительной массовой концентрации коксовой составляющей ξ_3 на рис. 6, а в интервале $0 \div 0,05$ мс обусловлено одновременным воздействием как скоростной релаксации, при которой растет плотность всех компонентов твердой фазы, так и уменьшения относительного содержания твердых летучих в частице при переходе их в газовую фазу. Как видно, характерные времена указанных двух процессов близки. После завершения процесса выхода летучих изменение ξ_3 определяется соотношением динамики изменения плотности на оставшемся участке скоростной неравновесности и скорости поверхностного горения коксовой составляющей, определяемой в соответствии с законом Аррениуса температурой частиц.

На рис. 7 показаны результаты расчетов на стадии горения, полученные по настоящей модели и в односкоростном приближении [3]. Как видно, несмотря на некоторое расхождение, обусловленное тем, что значения кинетических констант в [3] взяты из других литературных источников и несколько отличаются, результаты хорошо согласуются. Основные характеристики детонационной структуры — максимальное давление и характерное время выхода на равновесное состояние, определяемое временем сгорания частицы, практически совпадают. На рис. 7, б приведены скорости фаз и число Маха, определяемое по равновесной скорости звука в газе в системе, связанной с фронтом детонационной волны. Выход числа Маха на равновесное значение $M_e = 1$ подтверждает, что имеет место режим Чепмена — Жуке. Также видно, что в детонационной волне основное время горения частицы (превышающее более чем на два порядка время задержки воспламенения) приходится на протекание процесса в условиях скоростного равновесия фаз.

Таким образом, анализ результатов численных расчетов показал, что различие скоростей и температур фаз существенно только на стадии воспламенения, которая протекает на два порядка быстрее стадии горения коксовой составляющей. Однако поскольку процессы воспламенения определяют детонационную способность угольных пылевзвесей, то для задач, связанных с возбуждением и распространением детонации и получением надежных критериев ударно-волнового инициирования, факторы скоростной и температурной неравновесности фаз должны приниматься во внимание.

ВЫВОДЫ

В работе развита математическая модель детонации газовзвеси частиц угольной пыли в рамках двухскоростного двухтемпературного приближения механики гетерогенных сред, учитывающая воспламенение и горение компонентов. Приняты во внимание основные химические реакции: пиролиз, горение летучих и поверхностное горение коксовой составляющей частицы, тепловая неоднородность частицы, температура торможения газа и изменение адиабаты газа на ударной волне.

Модель приведена в соответствие с известными экспериментальными данными по зависимости скорости стационарной детонации га-

зовзвеси от концентрации и по задержкам воспламенения частиц битуминизированного угля за проходящими ударными волнами.

Показано, что скоростная неравновесность фаз оказывает значительное влияние на динамику нагрева частицы и срыв теплового равновесия для битуминизированных углей; воспламенение взвеси частиц битуминизированного угля происходит по смешанному (гомогенно-гетерогенному) типу; пористость частицы в поверхностной реакции окисления углерода мало влияет на время задержки воспламенения, определяющее влияние на него оказывает динамика выхода и горения летучих.

Анализ структуры течения при воспламенении и горении угольных частиц за ударными волнами и в детонационных волнах показал, что время горения намного превышает время стадии воспламенения, а также времена тепловой и скоростной релаксации фаз. Структуры течения в зоне горения, полученные по односкоростной и двухскоростной модели, хорошо согласуются между собой.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Nettleton M. A., Stirling R.** Detonation in suspensions of coal dust in oxygen // *Combust. Flame*. 1973. V. 21. P. 307–314.
2. **Эдвардс Д., Фёрнлей 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.
3. **Федоров А. В., Хмель Т. А.** Математическое моделирование детонационных процессов в газозвеси частиц угля // *Физика горения и взрыва*. 2002. Т. 38, № 6. С. 103–112.
4. **Борисов А. А., Гельфанд Б. Е., Цыганов С. А. и др.** Воспламенение пылей за ударными волнами // *Хим. физика*. 1983. № 8. С. 1127–1128.
5. **Sichel M., Baek S. W., Kauffman C. W., et al.** The shock wave ignition of dusts // *AIAA Journal*. 1985. V. 23, N 9. P. 1374–1380.
6. **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. 101–112.
7. **Бойко В. М., Папырин А. Н., Поплавский С. В.** О механизме воспламенения пылей в проходящих ударных волнах // *Физика горения и взрыва*. 1993. Т. 29, № 3. С. 143–148.
8. **Гостеев Ю. А., Федоров А. В.** Математическое моделирование подъема и воспламенения частиц угольных отложений // *Физика горения и взрыва*. 2003. Т. 39, № 2. С. 67–74.
9. **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.
10. **Smoot L. D., Horton M. D., Williams G. A.** Propagation of laminar pulverized coal-air flames / 16th Intern. Symp. on Combustion. Pittsburgh: The Combustion Inst., 1977. P. 375–387.
11. **Кореньков В. В., Охитин В. Н.** Численная оценка влияния плотности ВВ на параметры воздушных ударных волн // *ПМТФ*. 1983. № 3. С. 127–130.
12. **Бойко В. М., Киселев В. П., Киселев С. П. и др.** О взаимодействии ударной волны с облаком частиц // *Физика горения и взрыва*. 1996. Т. 32, № 2. С. 86–99.
13. **Ждан С. А., Прохоров Е. С.** Детонация взвеси частиц гексогена, частично заполняющей цилиндрический канал // *Физика горения и взрыва*. 1999. Т. 35, № 4. С. 79–87.
14. **Ubhayakar S. K., Stickler D. B., Von Rosenberg C. W., Jr., Gannon R. E.** Rapid devolatilization of pulverized coal in hot combustion gases // 16th Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh: The Combustion Inst., 1977. P. 427–436.
15. **Lester T. W., Seeker W. R., Merklin J. F.** The influence of oxygen and total pressure on the surface oxidation rate of bituminous coal / 18th Intern. Symp. on Combustion. Pittsburgh: The Combustion Inst., 1981. P. 1257–1265.
16. **Smith I. W.** The combustion rates of coal chars: A review // Nineteenth Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh: The Combustion Inst., 1982. P. 11045–1065.
17. **Libby P. A., Blake T. A.** Theoretical study of burning carbon particles // *Combust. Flame*. 1979. V. 36. P. 139–169.
18. **Федоров А. В., Хмель Т. А.** Математическое моделирование детонации алюминиевой пыли в кислороде с учетом скоростной неравновесности частиц // *Физика горения и взрыва*. 1997. Т. 33, № 6. С. 80–91.
19. **Гостеев Ю. А., Федоров А. В.** Воспламенение газозвесей частиц угля. Точечное приближение // *Физика горения и взрыва*. 2001. Т. 37, № 6. С. 36–45.

Поступила в редакцию 24/XII 2003 г.