

УДК 662.612:32

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОДАВЛЕНИЯ ДЕТОНАЦИИ ИНЕРТНЫМИ ЧАСТИЦАМИ В СМЕСЯХ МЕТАН — КИСЛОРОД И МЕТАН — ВОДОРОД — КИСЛОРОД

Д. А. Тропин, А. В. Фёдоров

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, 630090 Новосибирск
d.a.tropin@itam.nsc.ru, fedorov@itam.nsc.ru

На основе разработанной физико-математической модели ослабления и подавления детонации в смеси метана и кислорода путем добавления облака инертных частиц исследовано влияние объемной концентрации и диаметра частиц на скорость детонационной волны. Найдены пределы детонации по объемной концентрации частиц в смесях метан — кислород и метан — водород — кислород. Сопоставление с полученными нами ранее данными по подавлению детонации в водородокислородной смеси выявило, что критические объемные концентрации частиц, приводящие к подавлению детонационной волны, в смеси метан — водород — кислород больше, чем в смеси водород — кислород.

Ключевые слова: подавление детонации, детальная химическая кинетика, метанокислородная смесь.

ВВЕДЕНИЕ

Вопросы детонации взвесей реагирующих газов и твердых инертных/реагирующих частиц привлекают внимание многих исследователей. Эта проблема актуальна, например, при добыче угля в угольных шахтах. Выделяющийся в ходе работ природный газ, который состоит в основном из метана и небольшого количества более тяжелых углеводородов, может стать источником взрыва.

Одним из способов подавления взрыва, т. е. неконтролируемой детонации, является добавление инертных частиц. В данной работе проведено численное исследование процессов ослабления детонации и ее гашения в смесях метана, водорода и кислорода облаками инертных частиц в рамках двухскоростной двухтемпературной модели механики двухфазных сред, дополненной уравнениями упрощенной детальной химической кинетики [1].

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим полубесконечное одномерное пространство, заполненное стехиометрической

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 14-08-31044-мол_а, 12-08-00311-а), интеграционного проекта СО РАН — НАН Беларуси.

© Тропин Д. А., Фёдоров А. В., 2014.

смесью метана и кислорода, а также облаком частиц песка, расположенным на расстоянии $l = 0.3$ м от диафрагмы, разделяющей камеру высокого давления (КВД) и камеру низкого давления (КНД). КВД расположена между точками 0 и 0.2 м и заполнена в начальный момент времени кислородом с высокими значениями параметров состояния ($p_1^0 = 20$ атм, $T_1^0 = 3000$ К). КНД заполнена стехиометрической метанокислородной смесью с начальными параметрами $p_0 = 1$ атм, $T_0 = 300$ К. После разрыва диафрагмы в КНД распространяется ударная волна и происходит инициирование детонационной волны, которая до входа в облако частиц выходит на режим Чепмена — Жуге.

Математическая модель механики реагирующей смеси газов (метан — кислород) и инертных частиц записывается в виде системы уравнений, описывающей данное явление в рамках неравновесной динамики смеси газа и твердых частиц:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_1 u_1)}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial(\rho_1 u_1)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_1 u_1^2 + m_1 p)}{\partial x} = p \frac{\partial m_1}{\partial x} - f,$$

$$\frac{\partial(\rho_1 E_1)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_1 u_1 (E_1 + m_1 p / \rho_1))}{\partial x} =$$

$$= -p \frac{\partial m_1}{\partial t} - q - f(u_1 - u_2), \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 u_2)}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial(\rho_2 u_2)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 u_2^2 + m_2 p)}{\partial x} = p \frac{\partial m_2}{\partial x} + f,$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_2 E_2)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 u_2(E_2 + m_2 p / \rho_2))}{\partial x} = \\ = -p \frac{\partial m_2}{\partial t} + q + f(u_1 - u_2). \end{aligned}$$

Индекс 1 относится к смеси газов, 2 — к частицам, $E_i = e_i + u_i^2/2$ — полная энергия фазы или компонента, u_i, e_i — скорость и внутренняя энергия i -й фазы, p — давление смеси, m_i — объемная концентрация i -й фазы, ρ_i — средняя плотность i -й фазы, $\rho_i = m_i \rho_{ii}$, где ρ_{ii} — истинная плотность i -й фазы. Внутренняя энергия реакционноспособной смеси определяется из соотношения

$$e_1 = c_{v,1} T_1 + \sum_{\alpha=1}^{15} \xi_{\alpha} h_{0\alpha} - c_{p,1} T_{00},$$

где c_p, c_v — удельная теплоемкость смеси при постоянном давлении и постоянном объеме, ξ_{α} — относительная массовая концентрация компонента α , $c_v = \sum_{\alpha=1}^{15} c_{v\alpha} \xi_{\alpha}$, $h_{0\alpha}$ — энтальпия образования компонента. Число компонентов α меняется от 1 до 15, $T_{00} = 298.15$ К. Внутренняя энергия частиц $e_2 = c_{v,2} T_2$.

Законы силового взаимодействия и теплообмена между газом и частицами выражаются известными формулами:

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

$$q = \frac{6m_2 \lambda_1}{d^2} \text{Nu} (T_2 - T_1).$$

Зависимость числа Нуссельта от чисел Рейнольдса и Прандтля принимается в виде $\text{Nu} = 2 + 0.6 \text{Re}^{1/2} \text{Pr}^{1/3}$. Для коэффициента сопротивления используем формулу, в которой учитывается его зависимость от числа Рейнольдса и числа Маха относительного движения частиц:

$$C_D = \left[1 + \exp \left(-\frac{0.43}{\text{M}_{12}^{4.67}} \right) \right] \left(0.38 + \frac{24}{\text{Re}} + \frac{4}{\sqrt{\text{Re}}} \right),$$

где

$$\text{Re} = \frac{\rho_{11} d |u_1 - u_2|}{\mu}, \quad \text{M}_{12} = \frac{|u_1 - u_2| \sqrt{\rho_{11}}}{\sqrt{\gamma_1 p}},$$

γ_1 — показатель адиабаты газа.

Систему (1) дополним уравнением состояния для газовой смеси в целом

$$p = \rho_{11} T_1 R \sum_{\alpha=1}^{15} \frac{\xi_{\alpha}}{M_{\alpha}} \quad (2)$$

и уравнениями детальной кинетики [7]

$$\begin{aligned} \frac{d\xi_{\alpha}}{dt} = \frac{1}{\rho} M_{\alpha} \sum_{r=1}^l \rho^{m_r} (\nu'_{\alpha r} - \nu_{\alpha r}) \times \\ \times \left[k_{fr} \prod_{\beta=1}^8 \left(\frac{\xi_{\beta}}{M_{\beta}} \right)^{\nu_{\beta r}} - k_{br} \prod_{\beta=1}^8 \left(\frac{\xi_{\beta}}{M_{\beta}} \right)^{\nu'_{\beta r}} \right]. \quad (3) \end{aligned}$$

Здесь M_{α}, M_{β} — молекулярные массы компонентов α, β ; $\xi_{\alpha}, \xi_{\beta}$ — относительные массовые концентрации компонентов α, β ; m_r — порядок r -й реакции, $\alpha = 1, \dots, 15$; $\nu_{\alpha r}, \nu_{\beta r}$ — стехиометрические коэффициенты, со штрихом — относящиеся к продуктам реакции r ; k_{fr}, k_{br} — скорости прямой и обратной реакций. Система (1)–(3) позволяет после постановки соответствующей начально-краевой задачи инициирования/гашения детонации рассчитать картину распространения ударной/детонационной волны в канале, заполненном смесью реагирующих газов и движущихся инертных частиц.

МОДЕЛЬ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И ГОРЕНИЯ РЕАГИРУЮЩЕЙ ГАЗОВОЙ СМЕСИ И ЕЕ ВЕРИФИКАЦИЯ

Для описания кинетики воспламенения и горения реагирующей смеси метана и кислорода используем упрощенную детальную кинетическую схему [1], которая учитывает 92 прямые и обратные реакции с участием пятнадцати компонентов ($\text{H}_2, \text{O}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{OH}, \text{O}, \text{H}, \text{HO}_2, \text{H}_2\text{O}_2, \text{CH}_4, \text{CH}_3, \text{CH}_3\text{O}, \text{CH}_2\text{O}, \text{HCO}, \text{CO}_2, \text{CO}$). Упрощение заключалось в следующем. На рис. 1 представлен механизм окисления метана, взятый из работы [2]. Здесь присутствуют две ветви: распад на более простые углеводороды с образованием угарного и углекислого газа и

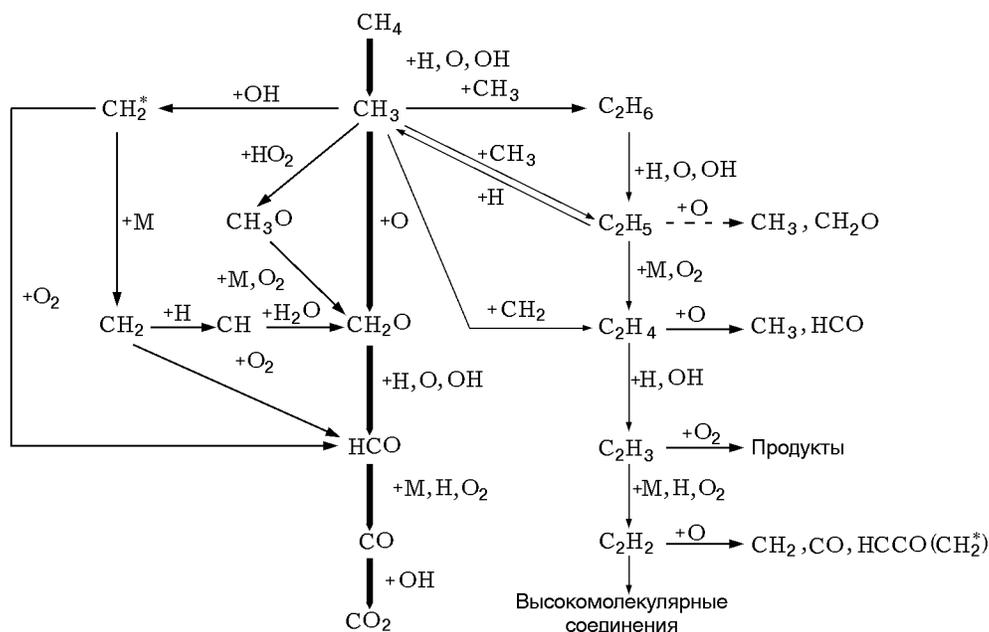


Рис. 1. Механизм окисления метана [2]

образование сложных углеводородов. В [3] детально описаны элементарные реакции, происходящие при окислении метана, и сделан качественный вывод, что ветвь образования сложных углеводородов не влияет на воспламенение и горение метана, так как концентрации этих углеводородов практически равны нулю. Поэтому мы исключили эту ветвь из кинетики [1]. Полный механизм окисления метана рассмотрен в работах [4, 5]. Элементарные реакции и выражения для их скоростей приведены в [1].

Выполненная в [1] верификация полной кинетической схемы по времени индукции показала, что рассчитанные по данной схеме период индукции и длина зоны индукции хорошо коррелируют с экспериментальными данными независимо от типа топлива (метан или водород), разбавления азотом, начального давления и начальной температуры смеси. Убедимся, что модифицированная кинетическая схема также удовлетворительно описывает экспериментальные данные еще и вне зависимости от количества окислителя и разбавления другим инертным газом — аргоном. На рис. 2 приведены расчетные и экспериментальные [6] зависимости времени задержки воспламенения метана от температуры за ударной волной. Данные двух экспериментов, различающихся содержанием окислителя (кислорода) и инертного газа (аргона) в смеси, удовлетворительно соответ-

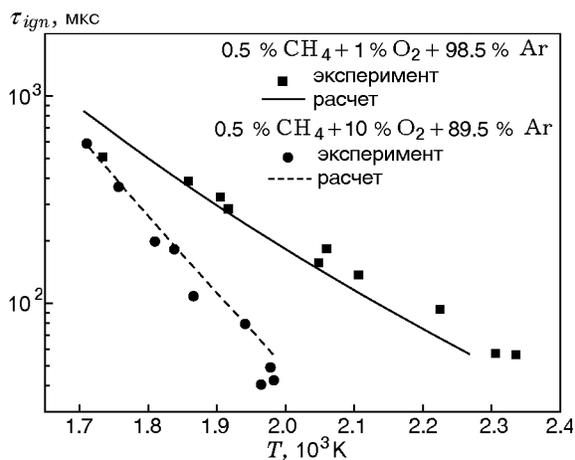


Рис. 2. Зависимости времени задержки воспламенения метана от температуры за ударной волной. Сравнение расчетных данных с экспериментальными [6]

ствуют результатам расчета. Кроме того, расчет для смеси с большим количеством инертного газа и малым количеством окислителя дает слегка заниженные значения времени задержки воспламенения, в то время как расчет с меньшим количеством инертного газа и большим количеством окислителя несколько завышает эти значения по сравнению с экспериментальными данными.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОСЛАБЛЕНИЯ ДЕТОНАЦИИ

На рис. 3 представлены зависимости дефицита скорости детонации в метанокислородной и водородокислородной смесях от объемной концентрации инертных частиц диаметром 10 и 100 мкм. Дефицит скорости детонации определяется по формуле $\eta(m_2) = D(m_2)/D_{CJ}$, где $D(m_2)$ — скорость детонации в смеси газа и частиц, D_{CJ} — скорость детонации Чепмена — Жуге. Видно, что увеличение объемной концентрации частиц приводит к уменьшению дефицита скорости детонации. Кроме того, при постоянной объемной концентрации частиц и уменьшении их диаметра дефицит скорости детонации также уменьшается. Таким образом, влияние концентрации и диаметра частиц на дефицит скорости детонации в метанокислородной смеси аналогично влиянию в водородокислородной смеси, описанному в работах [7–10].

Кроме того, на рис. 3 все зависимости для метанокислородной смеси лежат правее, чем для водородокислородной, при одинаковых диаметрах частиц. Объясняется это следующим образом. В метанокислородной смеси скорость детонации значительно меньше ($D_{CH_4-2O_2} = 2440$ м/с), чем в смеси водородокислородной ($D_{2H_2-O_2} = 2750$ м/с), скорость потока за фронтом детонационной волны также ниже. Таким образом, меньше различаются скорости газа и частиц, следовательно, сокращается отъем импульса и энергии частицами в результате их

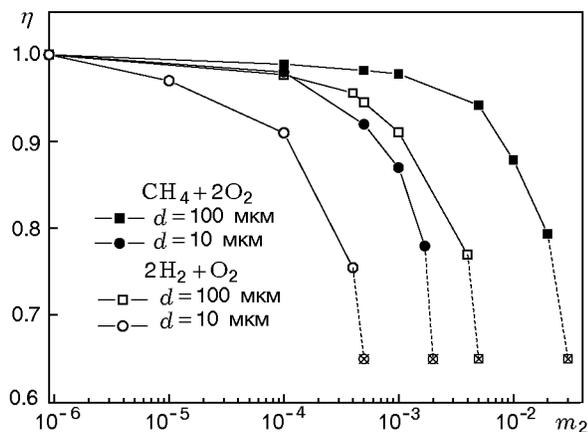


Рис. 3. Зависимость дефицита скорости детонации в смесях метан — кислород и водород — кислород от объемной концентрации частиц

трения с газом.

На рис. 3 обозначены также концентрационные пределы детонации (перечеркнутые значки) — значения объемной концентрации частиц, при которых происходит распад детонационной волны на затухающие замороженную ударную волну и волну воспламенения и горения. Этот процесс подавления подробно описан в работе [11]. В метанокислородной смеси пределы для 10- и 100-микронных частиц равны $m_2^* = 2 \cdot 10^{-3}$ и $3 \cdot 10^{-2}$ соответственно.

Представляется интересным определить, как изменятся концентрационные пределы детонации и зависимости дефицита скорости детонации при разбавлении метанокислородной смеси водородом. Предположительно, эти зависимости должны сместиться влево к зависимостям для водородокислородной смеси. На рис. 4 приведены зависимости $\eta(m_2)$ для смесей метан — водород — кислород и метан — кислород. Оказалось, что при разбавлении водородом зависимости сместились еще дальше вправо. Объяснить это можно следующим образом. Разбавление смеси водородом увеличило, с одной стороны, отъем импульса и энергии за счет трения, а с другой — тепловыделение в зоне химических реакций. Но, как оказалось, тепловыделение возросло больше, чем отъем импульса и энергии за счет трения. Однако различие в увеличении этих параметров незначительно, поскольку зависимости не сильно сдвинуты вправо.

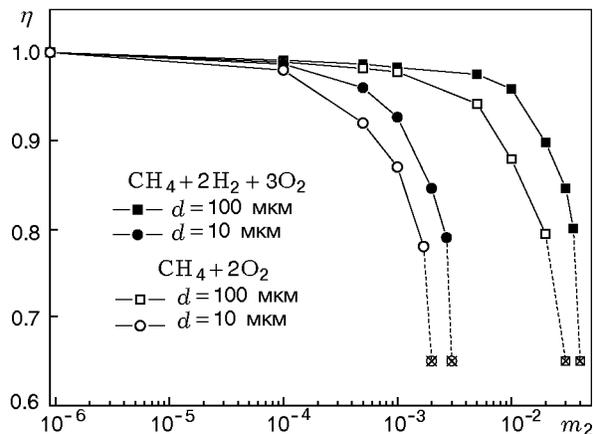


Рис. 4. Зависимость дефицита скорости детонации в смесях метан — кислород и метан — водород — кислород от объемной концентрации частиц

Пределы детонации в смеси метан — водород — кислород (см. перечеркнутые значки на рис. 4) равны $m_2^* = 3 \cdot 10^{-3}$ и $4 \cdot 10^{-2}$ для 10- и 100-микронных частиц соответственно, т. е. они изменились незначительно по сравнению со смесью метан — кислород.

Из рис. 3 и 4 видно, что критические объемные концентрации, подавляющие детонационную волну, наибольшие в смеси метан — водород — кислород и наименьшие в смеси водород — кислород.

ВЫВОДЫ

1. Предложена физико-математическая модель для описания ослабления и подавления детонации в смеси метана и кислорода путем добавления облака инертных частиц. Модель основана на двухскоростном двухтемпературном приближении механики гетерогенных сред и детальной кинетике химических превращений в детонационной волне.

2. Используемая кинетическая схема горения метана удовлетворительно описывает экспериментальные данные по времени задержки воспламенения при изменении температуры за фронтом детонационной волны вне зависимости от количества окислителя и разбавления инертным газом.

3. Исследовано влияние объемной концентрации и диаметра частиц на скорость детонации в смеси метан — водород — кислород. Найдены пределы детонации по объемной концентрации частиц. Наибольшие критические объемные концентрации, подавляющие детонацию, характерны для смеси метан — водород — кислород, наименьшие — для смеси водород — кислород.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Вестбрук Ч., Уртьев П.** Применение химической кинетики для определения критических параметров газовой детонации // Физика горения и взрыва. — 1983. — Т. 19, № 6. — С. 65–76.
2. **Warnatz J.** The structure of laminar alkane-, alkene- and acetylene flames // Proc. Combust. Inst. — 1981. — V. 18. — P. 749–767.
3. **Law C. K.** Combustion Physics. — Cambridge Univ. Press, 2006.
4. **Westbrook C. K., Creighton J., Dryer F. L.** A numerical model of chemical kinetics of combustion in turbulent flow reactor // J. Phys. Chem. — 1977. — V. 81. — P. 2542.
5. **Westbrook C. K.** Comprehensive mechanism for methanol oxidation // Combust. Sci. Technol. — 1979. — V. 20. — P. 125–140.
6. **Hidaka Y., Gardiner W. C., Jr., Eubank C. S.** Shock-tube and modeling study of methane pyrolysis and oxidation // J. Mol. Sci. — 1982. — V. 2. — P. 141–153.
7. **Федоров А. В., Тропин Д. А., Бедарев И. А.** Математическое моделирование подавления детонации водородокислородной смеси инертными частицами // Физика горения и взрыва. — 2010. — Т. 46, № 3. — С. 103–115.
8. **Федоров А. В., Фомин П. А., Фомин В. М., Тропин Д. А., Чен Дж.-Р.** Физико-математическое моделирование подавления детонации облаками мелких частиц. — Новосибирск: НГАСУ (Сибстрин), 2011.
9. **Fedorov A. V., Fomin P. A., Fomin V. M., Tropin D. A., Chen J. R.** Mathematical analysis of detonation suppression by inert particles // NKFUST, Kaohsiung, Taiwan, 2012.
10. **Фомин П. А., Чен Дж.-Р.** Влияние химически инертных частиц на параметры и подавление детонации в газах // Физика горения и взрыва. — 2009. — Т. 45, № 3. — С. 77–88.
11. **Федоров А. В., Тропин Д. А.** Моделирование прохождения детонационной волны через облако частиц в двухскоростной, двухтемпературной постановке // Физика горения и взрыва. — 2013. — Т. 49, № 2. — С. 61–70.

Поступила в редакцию 10/Х 2013 г.