

Zdzisław Dyduch*

SZACOWANIE LAMINARNEJ SZYBKOŚCI SPALANIA MIESZANIN PYŁ-POWIETRZE NA PODSTAWIE POMIARÓW CIŚNIENIA W KOMORZE SFERYCZNEJ

Streszczenie

W artykule opisano trudności związane z implementacją procedury dopasowania parametrów modelu Dahoe do wyników doświadczalnych uzyskiwanych w standardowej komorze 20-l. Przedstawiono trzy metody przezwyciężenia tych trudności. Zastosowanie tych metod poprawia jakość dopasowania parametrów modelu Dahoe do wyników pomiarów ciśnienia wybuchu w komorze 20-l i w konsekwencji istotnie zmniejsza niepewność wyznaczania laminarnej szybkości spalania.

An assessment of laminar burning speed of dust/air mixtures based on pressure measurement in a spherical chamber

Abstract

In the paper difficulties bounded with implementation of fitting procedure of the Dahoe model parameters to experimental results obtained in the standard 20-l spherical chamber were discussed. Three methods of overcoming the difficulties were presented. Application of the methods improves the fit quality of parameters of Dahoe model to pressure histories measured in the 20-l sphere and in consequence significantly reduce uncertainty of assessment of the laminar burning speed.

WPROWADZENIE

Wybuchy pyłu od dawna są poważnym zagrożeniem w wielu gałęziach przemysłu. Jakkolwiek całkowite wyeliminowanie tego zagrożenia nie jest możliwe, to jednak zostały opracowane metody zapobiegania wybuchom, a także ograniczania ich skutków.

Właściwy dobór sposobu zwalczania wybuchu wymaga pewnych informacji o przebiegu tego zjawiska w konkretnej instalacji przemysłowej. Do tej pory podstawowym sposobem uzyskiwania takich informacji były badania. Choć znaczenie badań jest bezsporne, to mają one pewne ograniczenia. Należą do nich duży koszt ich wykonywania i ograniczenie stosowalności wyników do ściśle określonych warunków, narzuconych przez parametry urządzenia badawczego. Ważnym uzupełnieniem badań doświadczalnych stają się coraz częściej symulacje numeryczne zjawiska wybuchu mieszaniny pył-powietrze i gaz-powietrze.

Jedną z podstawowych trudności w modelowaniu zjawiska spalania deflagacyjnego mieszaniny pył-powietrze jest właściwy opis przebiegu wydzielania się energii cieplnej w przemianie chemicznej mieszaniny palnej w produkty spalania. W tym celu

* Główny Instytut Górnictwa – Kopalnia Doświadczalna „Barbara”.

najczęściej stosuje się modele bazujące na uproszczonym opisie propagacji frontu płomienia, z uwzględnieniem pewnej grupy zjawisk mających wpływ na szybkość spalania. Tak w przypadku modeli dla mieszanin gazowych, jak i pyłowych, właściwości materiału palnego uwzględnia się przez wprowadzenie pojęcia laminarnej szybkości spalania mieszaniny palnej. Jej wartość zależy od własności paliwa (pyłu lub gazu), nie zależy natomiast od warunków panujących w obszarze wybuchu. W ten sposób próbuje się oddzielić wpływ własności materiału palnego od pozostałych czynników decydujących o szybkości wydzielania się energii w reakcji spalania. Znajomość laminarnej szybkości spalania, a dokładniej – zależności laminarnej szybkości spalania od koncentracji pyłu, ma zatem podstawowe znaczenie w symulacjach numerycznych wybuchu mieszanin pyłowo-powietrznych. Bez przesady można stwierdzić, że dostępność stosunkowo prostej metody wyznaczania wspomnianej zależności pozwoliłaby na znaczne przyspieszenie rozwoju symulacji numerycznych tego typu.

Pomiar laminarnej szybkości spalania jest zadaniem szczególnie trudnym w przypadku mieszanin pył-powietrze. Z uwagi na to duże nadzieje wiąże się z metodą oznaczania tego parametru zaproponowaną przez Dahoe (2000). Metoda ta polega na wykorzystaniu pomiarów zmian ciśnienia w czasie wybuchu mieszaniny pyłowo-powietrznej w zamkniętej, sferycznej objętości oraz na wykorzystaniu modelu wybuchu bazującego na zasadach zachowania w ujęciu całkowym. Dopasowanie parametrów modelu do zmierzonych zmian ciśnienia pozwala na wyznaczenie laminarnej szybkości spalania w mieszaninie pyłowo-powietrznej. Zaletą metody Dahoe jest łatwość uzyskania przebiegów zmian ciśnienia w czasie wybuchu. Można w tym celu wykorzystać standardową komorę sferyczną o objętości 20 dm³. Pewne trudności stwarza natomiast wyznaczanie laminarnej szybkości spalania za pomocą modelu wybuchu. Procedura dopasowania parametrów modelu do wyników doświadczalnych naraża na pewne problemy tak natury numerycznej, jak i interpretacyjnej.

1. LAMINARNA SZYBKOŚĆ SPALANIA

Stosowanie pojęcia laminarnej szybkości spalania w odniesieniu do mieszanin pyłowo-powietrznych budzi pewne kontrowersje. W przypadku mieszanin gazowych laminarna szybkość spalania jest fizyczną właściwością mieszaniny, podobną na przykład do lepkości płynu. Podobnie jak lepkość, laminarna szybkość spalania mieszaniny gazów palnych zależy od składu chemicznego mieszaniny, struktury molekularnej składników, temperatury i ciśnienia. Dodatkowo, szybkość spalania zależy od lokalnych gradientów prędkości, analogicznie jak w przypadku lepkości cieczy newtonowskich.

Kontrowersje związane z laminarną szybkością spalania mieszanin pyłowo-powietrznych wynikają z trudności z fizyczną interpretacją tej wielkości. Laminarna szybkość spalania jest definiowana jako szybkość przemieszczania się frontu płomienia w kierunku normalnym do jego powierzchni, w stronę niespalonej mieszaniny. Zatem, aby można było mówić o laminarnej szybkości spalania, konieczne jest istnienie ciągłej powierzchni frontu płomienia. Tymczasem, choć w makroskali wybuch mieszaniny pyłowo-powietrznej wydaje się przebiegać w jednorodnej mieszaninie paliwa z utleniaczem, w rzeczywistości ma się do czynienia z pewną liczbą ziaren

paliwa zanurzonych w ośrodku ciągłym utleniacza. Można wprawdzie argumentować, że w przypadku mieszanin gazowych też ma się do czynienia z rozmieszczonymi w przestrzeni dyskretnymi cząstkami – molekułami. W tym jednak przypadku molekuły paliwa i utleniacza są oddalone od siebie zaledwie o kilka rozmiarów samych molekuł. Są to odległości znacznie mniejsze od ich średniej drogi swobodnej i dlatego fizyczne właściwości mieszaniny, które określają wielkość laminarnej szybkości spalania, takie jak przewodnictwo cieplne czy entalpia tworzenia, można rozpatrywać jako wartości lokalnie uśrednione po objętości. W przypadku ziaren paliwa o gęstości rzędu 1000 kg/m^3 i średnicy $15 \text{ }\mu\text{m}$ odległości między nimi w mieszaninie o koncentracji 500 g/m^3 wynoszą około $150 \text{ }\mu\text{m}$.

Pomimo, że mechanizm propagacji płomienia w mieszaninie pyłowo-powietrznej nie jest jeszcze dokładnie poznany, istnieje w zasadzie zgoda, że zasadniczą rolę odgrywa spalanie w fazie gazowej: produktów odgazowania i pirolizy bądź odparowanego materiału ziarna. Zależnie od relacji między szybkością spalania i szybkością wydzielania produktów lotnych, spalanie to może zachodzić w atmosferze otaczającej ziarno lub bezpośrednio na jego powierzchni. Jeżeli spalanie odbywa się bezpośrednio w pobliżu powierzchni ziaren, obszar spalania składa się z pewnej liczby oddzielnie palących się stref nietworzących jednego ciągłego frontu płomienia. W takim przypadku trudno jest mówić o laminarnej szybkości spalania w zdefiniowanym wyżej sensie. Równocześnie jednak, w przypadku wielu mieszanin pyłowo-powietrznych uzyskiwano w praktyce spalanie z dobrze określonym ciągłym frontem płomienia.

Pomimo opisanych wyżej zastrzeżeń dotychczas wykonano wiele badań, podczas których mierzono laminarną szybkość spalania mieszanin pyłowo-powietrznych. W niektórych przypadkach sens fizyczny wyznaczanych wielkości był wątpliwy, ich znajomość ułatwiała parametryzację szybkości reakcji, a więc i szybkości wydzielania się energii, wpływającej w decydujący sposób na przebieg wybuchu mieszaniny pyłowo-powietrznej. W procesie modelowania takich wybuchów laminarna szybkość spalania odzwierciedla wpływ własności materiału na przebieg reakcji. Jej znajomość ma zatem podstawowe znaczenie w symulacjach numerycznych wybuchu mieszanin pyłowo-powietrznych.

Pomiar laminarnej szybkości spalania mieszanin pyłowo-powietrznych wiąże się z dość poważnymi trudnościami wynikającymi głównie z uzyskiwania jednorodnych obłoków pyłu w nieruchomym ośrodku gazowym lub ośrodku z przepływem laminarnym. Naturalnym sposobem występowania pyłu jest tworzenie warstw i nagromadzeń pyłu osiadłego. Utworzenie jednorodnego obłoku wymaga czynnika powodującego uniesienie pyłu, na przykład podmuchu powietrza. Czynniki takie zaburzają jednak stan fazy gazowej, wprowadzając niepożądaną turbulencję.

Istnieje kilka tradycyjnych metod pomiaru laminarnej szybkości spalania mieszanin pyłowo-powietrznych. Z uwagi na wspomniane wyżej trudności, wszystkie te metody wymagają użycia dość złożonych specjalistycznych urządzeń i/lub aparatury pomiarowej. Z tego powodu są one wykorzystywane w nielicznych laboratoriach specjalistycznych.

Użyteczność symulacji numerycznych wybuchów pyłów jest ściśle związana z ich dostępnością. Aby tego typu badania odgrywały znaczącą rolę, potrzeba łatwego

dostępu do niezbędnych danych wejściowych modeli wybuchu, w szczególności laminarnej szybkości spalania mieszanin pyłowo-powietrznych. Specyficzne własności pyłów palnych, odróżniające je od gazów palnych, wymagają znajomości tego parametru praktycznie dla każdej mieszaniny, której właściwości wybuchowe mają być ocenione. Z tego powodu tak ważne są metody pozwalające na oszacowanie wartości laminarnej szybkości spalania z wykorzystaniem powszechnie dostępnych urządzeń badawczych. Do takich metod należą metody, których podstawę stanowią pomiary dokonywane podczas wybuchów doświadczalnych w zamkniętych komorach.

2. MODEL DAHOE

Model Dahoe jest klasycznym przykładem modeli bazujących na zasadach zachowania w ujęciu całkowym. Szczegółowy opis założeń modelu i sposób wyprowadzenia równań opisujących zmiany ciśnienia wybuchu można znaleźć w wielu publikacjach (np. Dahoe, Goey 2003; Dyduch, Majcher 2007). Podstawowe równanie modelu, opisujące szybkość zmian ciśnienia wybuchu, ma następującą postać

$$\frac{dP}{dt} = \frac{P_e - P_0}{V} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{1}{\gamma}} 4\pi S_u \frac{r_{\text{front}}^3 - r_{\text{rear}}^3}{3\delta} \quad (1)$$

gdzie:

- P_0 – ciśnienie początkowe,
- P_e – ciśnienie maksymalne,
- V – objętość przestrzeni sferycznej,
- δ – grubość płomienia,
- r_{front} i r_{rear} – granice obszaru spalania,
- S_u – szybkość spalania.

Równanie (1) uzupełniają zależności pozwalające na wyznaczenie położenia granic strefy spalania. W początkowej fazie wybuchu, kiedy promień frontu płomienia jest oddalony od punktu zapłonu o odległość mniejszą niż grubość płomienia ($r_{\text{front}} < \delta$)

$$r_{\text{front}} = \left(\frac{3\delta V}{\pi} \left[1 - \left(\frac{P_0}{P} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \frac{P_e - P}{P_e - P_0} \right] \right)^{\frac{1}{4}} \quad (2)$$

W późniejszej fazie wybuchu, kiedy $r_{\text{front}} \geq \delta$, granice te oblicza się z zależności

$$-\frac{\pi}{3\delta} \left[r_{\text{front}}^4 - (r_{\text{front}} - \delta)^4 \right] + V = V \left(\frac{P_0}{P} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \frac{P_e - P}{P_e - P_0} \quad (3)$$

$$r_{\text{rear}} = r_{\text{front}} - \delta$$

aż do momentu, kiedy front płomienia dociera do ścianek komory. Od tej chwili

$$r_{\text{front}} = R$$

$$\frac{\pi}{\delta} (R^4 - r_{\text{rear}}^4) + \frac{4\pi}{3\delta} (r_{\text{rear}}^4 - R^3 r_{\text{rear}}) = V \left(\frac{P_0}{P} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \frac{P_e - P}{P_e - P_0} \quad (4)$$

Warunki panujące w komorze doświadczalnej podczas przeprowadzania wybuchu powodują, że szybkość spalania S_u modelu nie jest oczywiście poszukiwaną laminarną szybkością spalania. Szybkość spalania mieszaniny zmienia się z temperaturą, ciśnieniem, a także stopniem turbulencji. Podobny rodzaj zależności wykazuje kolejny parametr modelu: grubość płomienia δ . Istnieje co najmniej kilka sposobów wyboru zależności parametrów modelu od wymienionych czynników (np. Dyduch, Majcher 2007). Dotychczas najbardziej obiecujące wyniki uzyskuje się, stosując zależności zaproponowane przez Dahoe. Zależności od temperatury i ciśnienia mają postać (Dahoe 2003):

$$S_u = S_{u0} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{c + \frac{\lambda-1}{\gamma} + \alpha}$$

$$\delta_L = \delta_{L0} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{c-\alpha} \quad (5)$$

Wartości parametrów c i α należy wyznaczać empirycznie, na przykład przez dopasowanie do wyników doświadczalnych.

Posługując się metodami analizy wymiarowej Dahoe (2000) wyprowadził też zależność wiążącą laminarną i turbulentną szybkość spalania, a także podobną zależność dla grubości laminarnego δ_L i turbulentnego δ_T płomienia:

$$\frac{S_u}{S_L} = 1 + \text{Da}^{a'} \left(\frac{u'_{rms}}{S_L} \right)^{b'}$$

$$\frac{\delta_T}{\delta_L} = 1 + \text{Da}^{a''} \left(\frac{l_l}{\delta_L} \right)^{b''} \quad (6)$$

W równaniach (6) u'_{rms} jest średniokwadratową prędkością pulsacyjną, l_l – całkowitą skalą długości, a Da – liczbą Damköhlera zdefiniowaną jako

$$\text{Da} = \frac{l_l}{\frac{u'_{rms}}{\delta_L} S_L} \quad (7)$$

Wielkości u'_{rms} i l_l w równaniach (6) i (7) można obliczyć, posługując się wzorami empirycznymi wyznaczonymi przez Dahoe (2000) dla komory sferycznej 20-l:

$$\frac{u'_{rms}}{u'^0_{rms}} = \left(\frac{t}{t_0}\right)^n$$

$$\ln\left(\frac{l_t}{l_t^0}\right) = a_1 \ln\left(\frac{t}{t_0}\right) + a_2 \left[\ln\left(\frac{t}{t_0}\right)\right]^2 \quad (8)$$

gdzie u'^0_{rms} , t_0 , l_t^0 , a_1 i a_2 są stałymi, których wartości zostały wyznaczone eksperymentalnie.

3. METODA DOPASOWANIA PARAMETRÓW MODELU

Parametry modelu Dahoe można wyznaczyć na podstawie dopasowania przebiegu zmian ciśnienia opisanych zależnością (1) do przebiegów doświadczalnych z wykorzystaniem równań dodatkowych (2)–(8). Dopasowanie to jest procedurą złożoną, ponieważ w wyniku dopasowania należy łącznie wyznaczyć osiem parametrów. Dodatkowo, pomiary prowadzone podczas wybuchów doświadczalnych w komorze 20 pozwalają na uzyskanie zmian ciśnienia w funkcji czasu, podczas kiedy podstawowe równanie modelu (1) opisuje zmiany szybkości narastania ciśnienia. Wyznaczenie laminarnej szybkości spalania polega zatem na dopasowaniu ośmiu parametrów funkcji danej równaniem różniczkowym zwyczajnym pierwszego stopnia, przy czym zależność od parametrów jest silnie nieliniowa. Z tego powodu konieczne jest bardzo precyzyjne zaprojektowanie procedury dopasowania tak, aby uzyskać możliwie dobrą zbieżność i oszacowanie parametrów modelu, zwłaszcza laminarną prędkość spalania S_L , obarczone akceptowalnymi niepewnościami pomiaru.

3.1. Położenie granic płomienia

W momencie, kiedy wybuch jest już rozwinięty położenie granic płomienia oblicza się z równań (3), a następnie (4). Dość złożona postać tych równań powoduje, że ich rozwiązanie zwykle znajduje się numerycznie. W równaniu (1) położenie granic płomienia jest zawarte jednak w wyrażeniu o postaci $r_{\text{front}}^3 - r_{\text{rear}}^3$. Wyrażenie takie jest typowym miejscem generowania dużych błędów numerycznych. W przypadku płomieni o niewielkiej grubości $r_{\text{front}}^3 \approx r_{\text{rear}}^3$ różnica takich wielkości pomnożona następnie przez wyrażenie o dużej wartości powoduje bardzo dużą niepewność obliczenia wartości końcowej. Aby tego uniknąć, warto zadbać o większą dokładność obliczania granic płomienia.

Dahoe i Skjold (2008) podali analityczne rozwiązanie pierwszego z równań (3):

$$\begin{aligned}
 r_{\text{front}} &= \frac{1}{2} \delta + \frac{3^{\frac{1}{3}} A_1}{6} - \frac{\left(\frac{1}{3^3} \delta \right)^2}{6 A_1} \\
 A_1 &= \left[9A + \sqrt{3(27A^2 + \delta^6)} \right]^{\frac{1}{3}} \\
 A &= 4R^3 \left[1 - \left(\frac{P_0}{P} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \frac{P_e - P}{P_e - P_0} \right]
 \end{aligned} \tag{9}$$

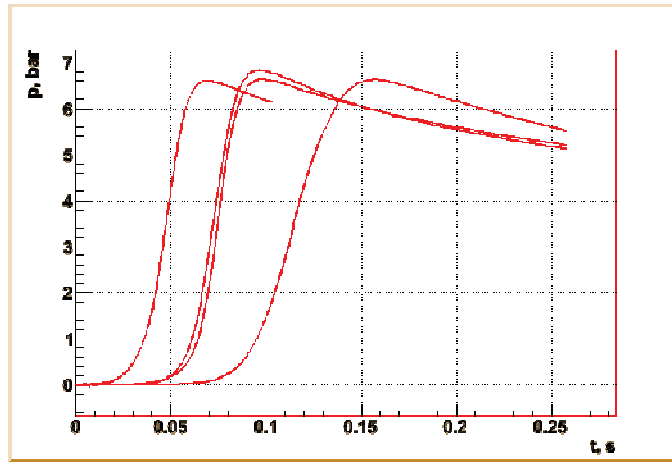
Wśród rozwiązań drugiego z równań (4) poszukiwany sens fizyczny ma postać:

$$\begin{aligned}
 r_{\text{rear}} &= \frac{1}{2} \sqrt{3} A^{\frac{1}{6}} \left[\sqrt{Z} - \frac{\sqrt{24R^3 \sqrt{3A} - Z^{\frac{3}{2}}}}{Z^{\frac{1}{4}}} \right] \\
 Z &= 2A^{\frac{2}{6}} + 4B \\
 A &= 8 \left(\frac{\sqrt{27R^{12} - B^3}}{3\sqrt{3}} + R^6 \right) \\
 B &= R^3 \left[3R - 4\delta \left(\frac{P_0}{P} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \frac{P_e - P}{P_e - P_0} \right]
 \end{aligned} \tag{10}$$

Rozwiązania analityczne (9) i (10) poprawiają dokładność obliczeń, a także umożliwiają poprawienie stabilności obliczeń w końcowej fazie wybuchu, kiedy front płomienia dociera do ścianek komory badawczej.

3.2. Czas indukcji wybuchu

Wyniki pomiarów zmian ciśnienia wybuchu w mieszaninie lycopodium-powietrze podczas czterech wybuchów przeprowadzonych w takich samych warunkach przedstawiono na rysunku 1. Pomimo to wyraźnie widać różnice między poszczególnymi wykresami ciśnienia. Znaczne przesunięcia przebiegów na osi czasu wskazują, że zapoczątkowanie poszczególnych wybuchów następowało w niektórych przypadkach po upływie znaczącego czasu, sięgającego nawet 60 ms. Takie zachowanie nie zostało przewidziane w modelu Dahoe, w którym przyjęto założenie, że wybuch rozpoczyna się natychmiast po zadziałaniu źródła zapłonu. Trudno też uwzględnić w modelu zjawisko powodujące opóźnienie zapłonu, ponieważ jego natura nie jest oczywista. Najprawdopodobniej na opóźnienie wpływa kilka zjawisk.



Rys. 1. Porównanie kilku przebiegów ciśnienia wybuchu pyłu lycopodium w tych samych warunkach:

C_n – koncentracja nominalna 875 g/m³

Fig. 1. Comparison of several pressure histories of the lycopodium dust explosion obtained in the same conditions:

C_n – nominal concentration i.e. 875 g/m³

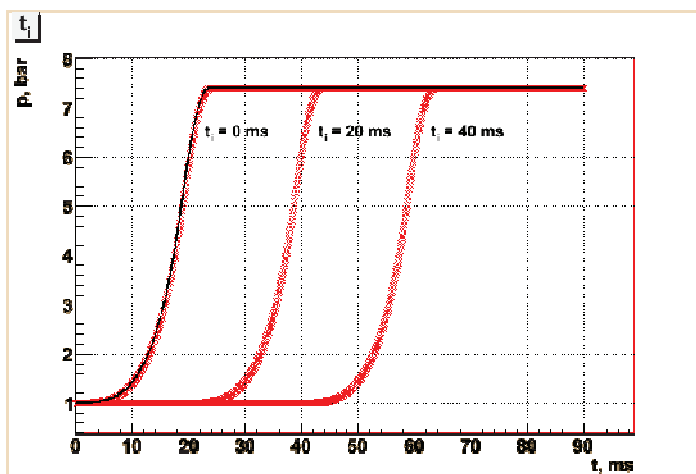
Pamiętając o zasadniczym celu obliczeń łatwiej jest wprowadzić dodatkowy parametr korygujący, odgrywający rolę czasu opóźnienia wybuchu t_i . Wprowadzenie czasu opóźnienia wybuchu wymaga modyfikacji podstawowego równania modelu (1), które przybiera teraz postać

$$\frac{dP}{dt} = \frac{P_e - P_0}{V} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{1}{\gamma}} 4\pi S_u \frac{r_{\text{front}}^3 - r_{\text{rear}}^3}{3\delta} \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{t - t_i}{\sigma} \right) \right] \quad (11)$$

Oprócz czasu opóźnienia zapłonu do równania (11) wprowadzono jeszcze jeden parametr σ , którego wartość należy odpowiednio dobrać. Wartość ta powinna być rzędu wartości rozdzielczości czasowej wyników pomiaru ciśnienia.

Wyniki całkowania równania (11) dla różnych wartości czasu opóźnienia zapłonu t_i przedstawiono na rysunku 2. Widać wyraźnie, że jedynym efektem modyfikacji równania (1) jest przesunięcie wykresu ciśnienia wzdłuż osi czasu. Wielkość tego przesunięcia określa wartość czasu opóźnienia zapłonu. Na rysunku zaznaczono także rozwiązanie oryginalnego równania (1). Rozwiązanie to pokrywa się z rozwiązaniem równania (11), kiedy $t_i = 0$ ms.

Ważne jest, aby wprowadzonej modyfikacji modelu Dahoe nie traktować jako rozszerzenia modelu przez uwzględnienie dodatkowych zjawisk wpływających w tym wypadku na efekt opóźnienia zapłonu. Jest to raczej oddzielenie z wyników doświadczalnych tej części zjawisk, których w modelu nie uwzględniono tak, aby poprawić jakość dopasowania parametrów modelu.



Rys. 2. Rozwiązanie równania (11) dla różnych wartości czasu opóźnienia zapłonu; linia ciągła – rozwiązanie oryginalnego równania (1)

Fig. 2. Solution of equation (11) for different values of ignition delay time; solid line – the solution of original equation (1)

3.3. Różniczkowanie czy całkowanie numeryczne?

Model Dahoe, wraz z zależnościami uzupełniającymi, umożliwia wyznaczenie nieznanymi parametrów, w szczególności wyznaczenie laminarnej szybkości spalania mieszaniny pyłowo-powietrznej i grubości płomienia wybuchu. Problem polega na znalezieniu najlepszej zgodności, w sensie χ^2 , funkcji opisującej zmiany ciśnienia w czasie z przebiegami doświadczalnymi, przy czym funkcja ta jest dana równaniem różniczkowym zwyczajnym pierwszego rzędu (11). Istnieją co najmniej dwa sposoby rozwiązania takiego problemu. Pierwszy polega na scałkowaniu równania (11), a następnie dopasowaniu parametrów otrzymanej funkcji. Zastosowanie tej metody napotyka jednak na pewne trudności. Zależność funkcji od parametrów jest nieliniowa, a to oznacza, że procedura dopasowania jest procedurą iteracyjną. W każdym kroku iteracji należy całkować numerycznie równanie (11), co pogarsza zbieżność procedury i powiększa niepewność wyznaczenia parametrów, a nawet może prowadzić do nieuzyskania zbieżności.

Zamiast całkować równanie (11) można zróżniczkować wyniki pomiarów i bezpośrednio przeprowadzić dopasowanie funkcji danej tym równaniem do tak przygotowanych danych. Różniczkowanie przeprowadza się tylko raz, na początku obliczeń. W stosunku do wcześniej opisanej, metoda ta ma pewne zalety, pod warunkiem, że proces obliczania pochodnej wyników doświadczalnych nie wprowadza znacznej niepewności. Podstawowe znaczenie ma zatem jakość metody aproksymacji pochodnej zmian ciśnienia w funkcji czasu otrzymanych w wyniku pomiarów.

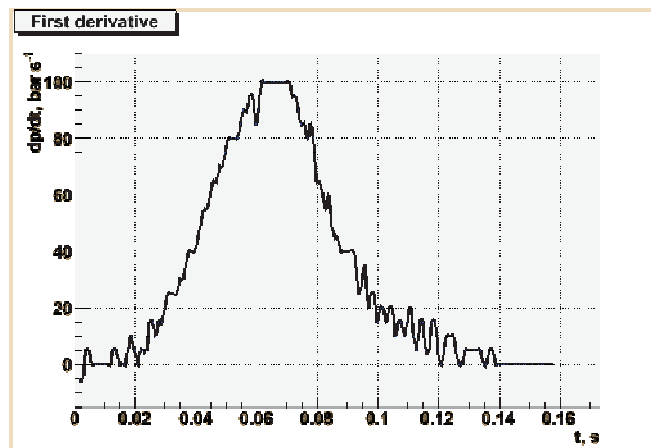
3.4. Estymacja pochodnej

Zagadnienie estymacji pochodnej można sformułować następująco: Dany jest zbiór punktów doświadczalnych (p_i, t_i) , z których każdy jest obarczony określoną niepewnością pomiarową. Należy znaleźć dobrą aproksymację p^a funkcji $p(t)$. Jeżeli funkcja p^a będzie dobrze odtwarzać funkcję p , to pochodna $p^{a'}$ powinna także być bliska p' . Generalnie, metody realizacji tego zadania można podzielić na lokalne i globalne (Ahnert, Abel 2007). W metodach lokalnych do aproksymacji wykorzystuje się tylko podzbiór dostępnych punktów, znajdujących się w pobliżu punktu, w którym przeprowadza się aproksymację. W metodach globalnych są wykorzystywane informacje „niesione” przez wszystkie punkty. Metody lokalne są często stosowane z powodu ich prostoty i łatwości implementacji. Nie dorównują jednak metodom globalnym w przypadku, kiedy jest wymagana duża dokładność estymacji.

Prostym przykładem metody lokalnej może być obliczanie pochodnej za pomocą centralnego ilorazu różnicowego

$$\frac{dP}{dt}(t_i) = \frac{P_{i+1} - P_{i-1}}{t_{i+1} - t_{i-1}} \quad (12)$$

Wynik zastosowania tej metody do pomiarów zmiany ciśnienia wybuchu pyłu lycopodium przedstawiono na rysunku 4. Widać na nim wyraźnie rozrzut wartości dP/dt wynikający ze skończonej dokładności pomiarów ciśnienia. Używając takiej aproksymacji w procedurze dopasowywania zależności (11) do wyników pomiaru ciśnienia wybuchu należy liczyć się ze znaczną niepewnością obliczeń.



Rys. 3. Szybkość zmian ciśnienia wybuchu obliczona za pomocą ilorazu różnicowego (12)

Fig. 3. Rate of explosion pressure rise calculated by means of the difference quotient (12)

W metodach globalnych konstruuje się estymator szukanej zależności funkcyjnej, wykorzystując informacje „niesione” przez wszystkie punkty doświadczalne w wybranym przedziale czasu (t_i, t_f) . Kształt zależności $P(t)$ nie jest znany i dlatego dopasowywana funkcja powinna zapewnić możliwość uzyskania dobrej zgodności

z zależnościami różnych kształtów. Warunek ten dobrze spełnia i często jest wykorzystywana w takiej roli kombinacja liniowa ortogonalnych bazowych funkcji skleja-nych B-spline

$$f(t) = \sum_{j=0}^{n+2} \gamma_j B_j(t) \quad (13)$$

W zależności (13) γ_j oznaczają współczynniki sześciennych funkcji bazowych B-spline $B_j(t)$ wyznaczone w procesie estymacji. Z uwagi na omawiane zastosowanie funkcja $f(t)$ ma bardzo korzystne własności. Przede wszystkim $f \in C^2$, co oznacza, że jej druga pochodna jest funkcją ciągłą. Dodatkowo zarówno pierwsza, jak i druga pochodna f są określone zależnościami analitycznymi.

Sama funkcja $f(t)$ nie spełnia jednak warunku optymalnej gładkości. Warunek ten można sformułować następująco

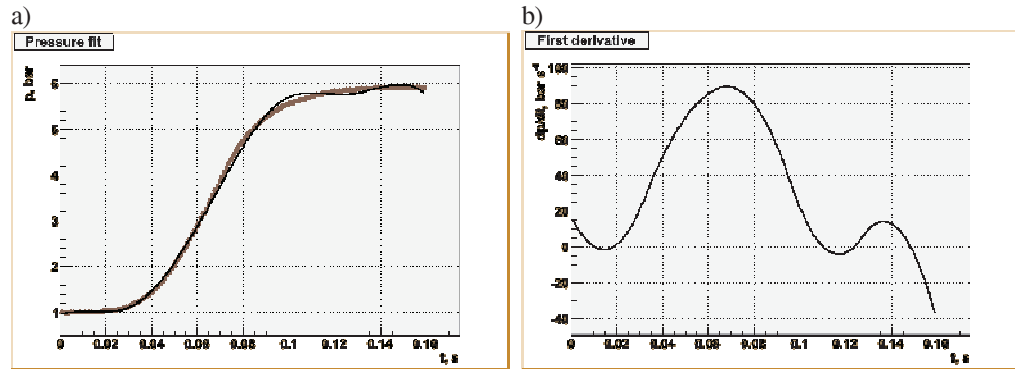
$$s(f) = \int_{t_j}^{t_f} \|f''(t)\|^2 dt \quad (14)$$

Maksymalizacja gładkości funkcji prowadzi do minimalizacji jej krzywizny. W rezultacie estymację funkcji opisującej zmiany ciśnienia wybuchu w czasie można przeprowadzić zwykle stosowaną metodą najmniejszych kwadratów, uzupełnioną więzami wymuszającymi odpowiednią gładkość rozwiązania

$$\chi^2 = \sum_i \frac{[P_i - f(t_i)]^2}{\sigma^2(P_i)} + \lambda \int_{t_i}^{t_f} [f''(t)]^2 dt \quad (15)$$

Stopień gładkości rozwiązania jest zależny od parametru λ . W ogólnym przypadku, odpowiedni dobór wartości tego parametru jest problemem nietrywialnym (Gu, Wahba 1991), jednak w rozpatrywanym przypadku wystarczająco dobre rezultaty daje zwykła obserwacja jakości dopasowania. Wyniki zastosowania opisanej metody przedstawiono na rysunkach 4–6. Każdy z rysunków zawiera dwa wykresy. Wykres części a) rysunku przedstawia wynik dopasowania funkcji $f(t)$ danej zależnością (13) do zmierzonych zmian ciśnienia wybuchu. Wykres części b) rysunku jest szukaną pochodną dopasowanej funkcji względem czasu.

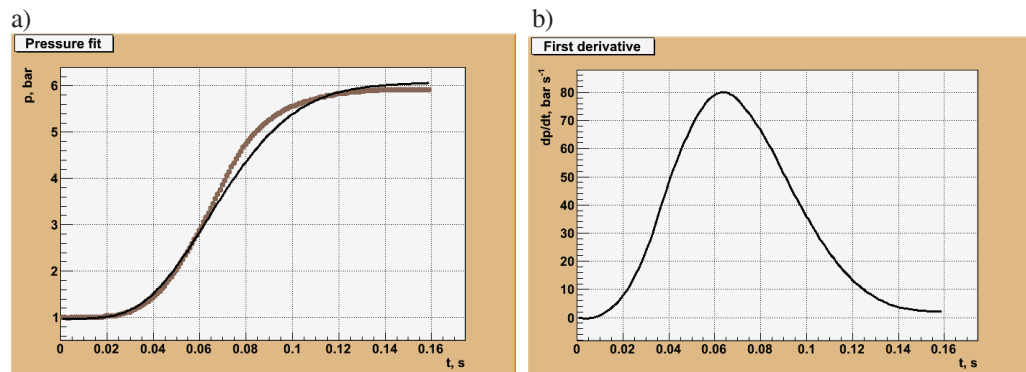
Wynik dopasowania bez dodatkowych więzów [bez drugiego składnika w zależności (15)] przedstawiono na rysunku 4. Jakość dopasowania jest daleka od zadowalającej, zwłaszcza w obszarze większych ciśnień, gdzie występują нефизyczne oscylacje funkcji dopasowywanej. Jeszcze wyraźniej jest to widoczne na wykresie pochodnej. Przykład ten uzasadnia konieczność zastosowania więzów wymuszających odpowiednią gładkość dopasowywanej funkcji.



Rys. 4. Ciśnienie (a) i szybkość zmian ciśnienia (b) wybuchu, obliczone za pomocą kombinacji liniowej funkcji B-spline bez więzów

Fig. 4. Explosion pressure (a) and rate of pressure rise (b) calculated by means of the combination of the linear B-spline function with no constraints

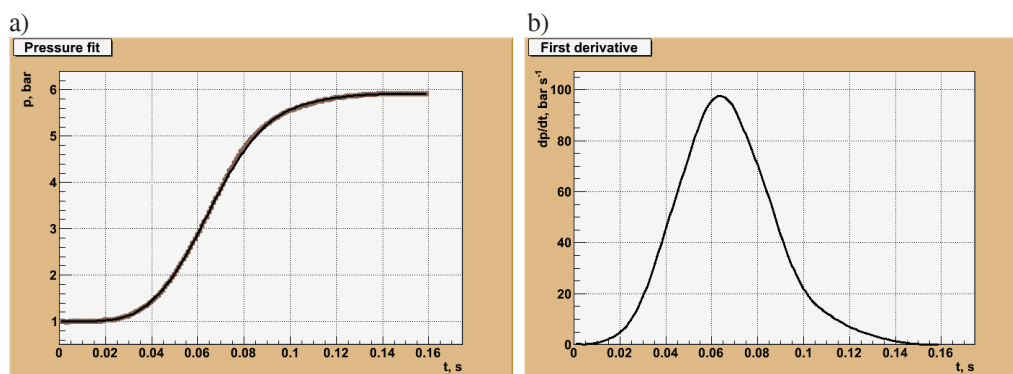
Na rysunku 5 przedstawiono wynik dopasowania z dodatkowymi więzami, ale z dobraną zbyt dużą wartością parametru λ . Funkcja dopasowywana nie odtwarza w pełni krzywizny charakterystycznej dla danych doświadczalnych. Największa niezgodność występuje oczywiście w obszarze, gdzie krzywizna ta jest największa. Wynikiem tego jest zbyt szerokie maksimum na wykresie pochodnej funkcji dopasowywanej.



Rys. 5. Ciśnienie (a) i szybkość zmian ciśnienia (b) wybuchu obliczone za pomocą kombinacji liniowej funkcji B-spline z więzami; wartość parametru wygładzającego λ jest zbyt duża

Fig. 5. Explosion pressure (a) and rate of pressure rise (b) calculated by means of combination of linear B-spline functions with constraints; the value of smoothing parameter λ is too high

Wyniki dopasowania, przedstawione na rysunku 6, wykazują dobrą zgodność funkcji dopasowywanej z wynikami pomiarów. Także kształt pochodnej tej funkcji względem czasu jest zgodny z oczekiwaniami. Wartość pochodnej jest równa zero w momencie zainicjowania wybuchu i zmniejsza się monotonicznie do zera w momencie osiągnięcia przez ciśnienie wybuchu wartości maksymalnej.



Rys. 6. Ciśnienie (a) i szybkość zmian ciśnienia (b) wybuchu obliczone za pomocą kombinacji liniowej funkcji B-spline z więzami; wartość parametru wygładzającego λ jest odpowiednio dobrana

Fig. 6. Explosion pressure (a) and rate of pressure rise (b) calculated by means of combination of the linear B-spline function with constraints; the value of smoothing parameter λ is properly selected

PODSUMOWANIE

W publikacji przedstawiono trzy metody zaproponowane w celu poprawiania dokładności wyznaczania laminarnej szybkości spalania w mieszaninie pył-powietrze. Podano zależności analityczne, opisujące położenie granic obszaru spalania mieszaniny podczas wybuchu. Wprowadzono dodatkowy czynnik do równania modelu Dahoe, pozwalający na oddzielenie z wyników doświadczalnych tej części zjawisk, która powoduje opóźnienie zapłonu, nieopisywane przez równania modelu. Omówiono procedurę obliczania pochodnej względem czasu z wyników pomiarów ciśnienia wybuchu. Pozwala ona na zastąpienie procedury dopasowywania zależności $P(t)$ bezpośrednim dopasowaniem zależności $dP/dt(t)$.

Wykonane obliczenia z wykorzystaniem opisanych metod potwierdziły znaczną poprawę jakości dopasowania równania modelu Dahoe do wyników pomiarów ciśnienia wybuchu w komorze 20-l i w konsekwencji istotne zmniejszenie niepewności wyznaczania laminarnej szybkości spalania.

Literatura

1. Ahnert K., Abel M. (2007): Numerical differentiation of experimental data: local versus global methods. *Computer Physics Communications* Vol. 177, s. 764–774.
2. Dahoe A.F. (2000): Dust explosions: a study of flame propagation. Ph.D. Thesis. Technical University of Delft.
3. Dahoe A.F., de Goey L.P.H. (2003): On the determination of the laminar burning velocity from closed vessel gas explosions. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* Vol. 16.
4. Dahoe A.F., Skjold T. (2008): Explofit: a brief user manual for version 0.99h. Working document.
5. Dyduch Z., Majcher B. (2007): Oznaczanie prędkości spalania w mieszaninach pyłowo-powietrznych z wykorzystaniem modelu wybuchu w zamkniętej objętości. *Prace Naukowe GIG. Górnictwo i Środowisko* nr 2.

6. Gu G., Wahba C. (1991): Minimizing GCV/GML scores with multiple smoothing parameters via the Newton method SIAM. J. Sci. Statist. Comput. Vol. 12, s. 383–398.

Recenzent: prof. dr hab. Kazimierz Lebecki