

химических процессов в зоне реакции на скорость и другие характеристики детонации. Очевидно, подобное явление имеет место и при детонации других систем со сложной кинетикой тепловыделения. В частности, в работе [19] отмечались скачки на зависимости $D(d)$ в системах гексоген — жидкий наполнитель (20—30% по массе). Большинство промышленных ВВ для горных работ и смесей для сварки взрывом относятся к такого типа системам.

Поступила в редакцию
22/III 1979

ЛИТЕРАТУРА

1. К. К. Шведов, А. Н. Ильин. Химическая физика процессов горения и взрыва. Детонация, Черногловка, 1977.
2. К. К. Шведов, А. И. Анискин, А. Н. Дремин. III Международный симпозиум по обработке металлов взрывом. Сб. докладов, т. 2. Марианске — Лазне, 1976.
3. А. Я. Апин, Г. В. Димза. Докл. АН СССР, 1970, 192, 4.
4. Ю. Б. Харитон.— В сб.: Вопросы теории ВВ. Вып. 1. М., Изд-во АН СССР, 1947.
5. Б. Н. Кукиб.— В сб.: Взрывное дело, № 60/17. М., Недра, 1976.
6. Р. Х. Курбангалина. ПМТФ, 1969, 4.
7. А. Я. Апин, Л. Н. Стесик. ПМТФ, 1965, 2.
8. Р. Х. Курбангалина, С. С. Рыбанин, Л. Н. Стесик.— В сб.: Горение и взрыв. М., Наука, 1972.
9. Ф. А. Баум, Б. И. Шехтер, К. П. Станюкович. Физика горения. М., Наука, 1959.
10. А. Я. Апин, И. М. Воскобойников, Г. С. Соснова. ПМТФ, 1963, 5.
11. Г. В. Димза.— В сб.: Взрывное дело, № 74/31. М., Недра, 1974.
12. А. К. Парфенов, И. М. Воскобойников. ФГВ, 1969, 5, 3.
13. К. К. Шведов, С. А. Колдунов, А. Н. Дремин. ФГВ, 1973, 9, 3.
14. В. Г. Хотин, В. А. Пономарев. ФГВ, 1973, 9, 2.
15. М. А. Соок. The Science of High Explosives New — York, Reinhold Publ. Corp. 1958.
16. К. К. Шведов, А. Н. Дремин.— В сб.: Горение и взрыв. М., Наука, 1977.
17. Н. М. Кузнецов. ЖЭТФ, 1967, 52, 1.
18. S. Paterson, P. Lamb. Les ondes de Detonation. Editions du centre national de La Recherche Scientifique. Anatole — France — Paris, 1962.
19. К. К. Шведов, А. А. Кривченко, В. П. Сальников. ФГВ, 1978, 14, 5.

ЗАМКНУТАЯ МОДЕЛЬ ПРЯМОГО ИНИЦИИРОВАНИЯ ГАЗОВОЙ ДЕТОНАЦИИ С УЧЕТОМ НЕУСТОЙЧИВОСТИ. I. ТОЧЕЧНОЕ ИНИЦИИРОВАНИЕ

В. Ю. Ульяницкий
(Новосибирск)

В настоящее время известен ряд полуэмпирических моделей прямого инициирования газовой детонации, где получены формулы для расчета критической энергии. Качественные характеристики процесса инициирования в большинстве из них либо вообще не рассматриваются, либо весьма далеки от реальных. Наиболее распространенные из этих моделей [1—6] рассмотрены в настоящей работе.

Первая физическая модель инициирования предложена в [1], где в результате учета конечной скорости реакции показано, что скорость инициирующей волны может проходить через минимум, а существование критической энергии определяется задержками воспламенения. В качестве необходимого условия возбуждения детонации предложен критерий: «время действия ударной волны к моменту, когда ее амплитуда равна амплитуде стационарной детонационной волны, должно быть не менее

периода индукции τ для данной смеси». Эта модель, выявляя интересные качественные характеристики процесса инициирования, к сожалению, не давала возможности практически рассчитывать критическую энергию.

Большинство из появившихся в последние годы моделей [2—5] в той или иной мере основано на идеях работы [1]. В [2] предлагается следующий критерий инициирования: время действия ударной волны к моменту, когда ее амплитуда равна амплитуде стационарной волны Чепмена — Жуге, должно быть не менее времени пребывания частицы газа в зоне между ударным фронтом и плоскостью Чепмена — Жуге. При расчете критической энергии время действия ударной волны берется из экспериментов по распространению ударных волн в воздухе, а расстояние до плоскости Чепмена — Жуге оценивается в элементарных ячейках, причем число ячеек определяется с точностью до порядка ($1 < \nu < 10$).

В [3] критерий инициирования записывается в виде $\Delta_*/R_* \leq \delta < 1$, где R_* — радиус ударной волны, при котором химическая энергия газа, заключенная в объеме этого радиуса, равна энергии источника инициирования, Δ_* — зона индукции, рассчитанная для стационарной ударной волны с параметрами за фронтом, совпадающими с параметрами на фронте инициирующей волны при $r = R_*$. При выводе расчетных формул для критической энергии, как и в [2], реакция за фронтом инициирующей волны не учитывалась. Величина параметра δ осталась неопределенной.

Обе эти модели не учитывают влияния химической реакции на движение инициирующей волны и поэтому в принципе не могут описывать физического процесса инициирования. Полученные формулы либо дают слишком грубую оценку критической энергии ($E_* \sim \nu^2$ [2]), либо не позволяют ее рассчитывать вообще ($E_* \sim \delta^{-\nu}$ [3]). Они могут представлять интерес лишь для оценки качественной зависимости критической энергии от разбавления смеси инертными добавками и от изменения относительной концентрации горючего и окислителя. Однако подобную оценку позволяет производить уже модель [1], поскольку основная зависимость в этом случае определяется τ .

В [4] для учета влияния химической реакции на движение инициирующей волны некоторая функция, описывающая тепловыделение за фронтом, выбирается таким образом, чтобы зависимость скорости инициирующей волны от расстояния имела минимум на начальном участке. Значение функции зависит от величины зоны индукции Δ . Критический режим определяется из условия, что скорость инициирующей волны не должна падать ниже значения, определяемого пределом самовоспламенения за фронтом ударной волны, движущейся с такой же скоростью. При расчете критической энергии величина зоны индукции на всем участке движения волны принималась постоянной и равной ее значению за гладкой стационарной волной Чепмена — Жуге.

Авторы [5], проводя аналогию с теорией инициирования горения, полагают, что критический режим определяется условием баланса энергии источника и химической энергии, выделяющейся к моменту, когда скорость инициирующей волны падает до минимума ($E = Q_0 k_v \times (R_* - \Delta_*)^{\nu}$). Величина минимума, как и в [4], определяется пределом самовоспламенения на фронте ударной волны в этот момент. Причем авторы [5] отмечают, что амплитуда затухающей волны, за которой невозможно самовоспламенение, в достаточной мере неопределенна, а при расчете выбирают $M_* = M_3 = 4$, в то время как в [4] для той же смеси $M_3 = 2,8$. При определении критической энергии Δ_* рассчитывалась для гладкой стационарной ударной волны с $M = M_*$.

Модели [4 и 5] дают качественное описание процесса инициирования того же уровня, что и [1]. Однако они не учитывают всегда присут-

ствуюющую в реальной волне неустойчивость, поэтому совпадение расчетной энергии с экспериментом достигается за счет произвола в выборе M_3 — числа Маха волны, за которой невозможно самовоспламенение. Так, например, в [5] $E_* \sim \tau^v \sim \exp(\nu E_a/RT_*)$, $T_* = T_3$ ($M_* = M_3$), и изменение M_* всего на 10% приводит к изменению критической энергии в несколько раз и даже (при больших E_a) на порядки.

В [6] формулы для оценки критической энергии инициирования получены на основе ранее разработанной авторами теоретической модели ячейки многофронтной детонации и экспериментов по инициированию детонации в полупространстве выходом детонационной волны из узкого канала.

В [7—9] задача об инициировании решается численно. Обнаружено [8], что учет конечной скорости реакции приводит к неустойчивости зоны индукции за фронтом ударной волны и к формированию так называемого «пульсирующего» режима. Однако полученные в [8] расчетные значения критической энергии для смеси $2H_2 + O_2$ превышают экспериментальные на 3—4 порядка; к тому же численный способ моделирования довольно громоздок и существенно затрудняет качественный анализ явления.

Таким образом, построение замкнутой приближенной аналитической модели инициирования представляет несомненный интерес, что и является целью настоящей работы.

В дальнейшем использованы следующие обозначения: p , ρ , T — давление, плотность и температура смеси соответственно; E_u — энергия (энергия на единицу длины, энергия на единицу площади) источника инициирования при $\nu = 3$ (2, 1); Q — химическая энергия смеси на единицу массы; D , M — скорость и число Маха ударной волны соответственно; D_0 , M_0 — скорость и число Маха детонации Чепмена — Жуге; γ — показатель адиабаты; τ — период индукции; A — константа в формулах для периода индукции; E_a — энергия активации; R — газовая постоянная; ρ_a — плотность смеси при атмосферном давлении; α — параметр сильного точечного взрыва; ν — показатель размерности ($\nu = 1, 2, 3$); r , t — координаты фронта ударной волны. Индексы: 0 — начальное состояние; 1 — точка разделения ударного фронта и фронта горения; 10 — состояние за фронтом ударной волны, скоростью которой равна D_0 ; параметры со звездочкой соответствуют критической точке.

Модель прямого инициирования

Эксперименты показывают, что неустойчивость зоны индукции за гладкой ударной волной характерна для большинства детонационных процессов в газовых смесях и приводит к образованию многофронтной структуры. Она оказывает решающее влияние на процесс инициирования и, в частности, на величину критической энергии.

В экспериментах по отражению ударных волн от стенки во взрывчатой смеси, например, [10], обнаружено, что по истечении периода индукции в области ударно-сжатого газа происходит вспышка и в результате формируется волна сжатия, развивающаяся в детонационную, которая догоняет ударный фронт, усиливает его и формирует стационарную детонационную волну. Такой же механизм развития неустойчивости получен и при численном решении задачи о возбуждении детонации плоской стационарной ударной волной в смеси $O_2 + O_3$ с точными уравнениями для описания химических реакций [11].

Можно полагать, что этот механизм будет работать и в случае точечного инициирования газовой детонации. Тогда движение инициирующей волны можно описать диаграммой, представленной на рис. 1. В некоторый момент времени t_0 , соответствующий амплитуде инициирующей волны, при которой химическая реакция за фронтом может идти уже

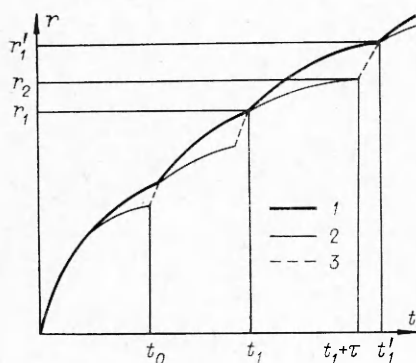


Рис. 1. Схема движения инициирующей волны при точечном взрыве в реагирующей среде.

деление ударного фронта и фронта горения. Траектория движения фронта горения будет совпадать с траекторией частицы, пересекающей передний ударный фронт в точке разделения (см. рис. 1, 2). По истечении периода индукции для частицы, пересекающей ведущий ударный фронт в момент разделения, в результате интенсивной экзотермической реакции вновь сформируется внутренняя детонационная волна и весь процесс в целом (пульсация) повторится.

При таком механизме совершенно ясно, что если в инициирующей волне будет выполнено условие конечности периода индукции для частицы, пересекающей ведущий ударный фронт в момент разделения, в какой бы точке пространства такое разделение не произошло, то будет гарантировано возбуждение пульсирующего детонационного режима во всем пространстве. Если же, хотя бы для одной частицы, пересекающей ведущий ударный фронт в момент разделения, период индукции не истечет, инициирующая волна затухнет и детонация возбуждена не будет. Тогда в рамках предлагаемой модели можно сформулировать следующий критерий инициирования: для возбуждения детонации в реагирующей смеси необходимо, чтобы был конечным период индукции для частицы, пересекающей фронт ведущей ударной волны в точке разделения, в какой бы момент времени (в какой бы точке на оси r_1) такое разделение ни произошло.

Согласно [12], период индукции для частицы, пересекающей ударный фронт при $t = t_1$, можно рассчитать по формуле

$$1 = \int_{t_1}^{t_1+\tau} \frac{dt}{\tau_\phi} = \int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{D\tau_\phi}. \quad (1)$$

Интегрирование в (1) проводится вдоль траектории частицы. Период индукции в настоящей модели имеет смысл задержки воспламенения, поэтому для его расчета при фиксированных параметрах (τ_ϕ) будем пользоваться формулами вида

$$\begin{aligned} \tau_\phi &= A(\rho_a/\rho)^n \exp(E_a/RT) && \text{при } T > T_3, \\ \tau_\phi &= \infty && \text{при } T \leq T_3, \end{aligned} \quad (2)$$

где T_3 — температура, соответствующая третьему пределу самовоспламенения.

Обозначая радиус ударной волны, при котором частица окажется в условиях, соответствующих третьему пределу самовоспламенения, через r_3 и используя (1), сформулированный выше критерий инициирова-

с достаточно интенсивным тепловыделением, в зоне индукции формируется детонационная волна (см. рис. 1, 3), догоняющая ведущий ударный фронт (см. рис. 1, 1). Выход внутренней детонационной волны на фронт ведущей приводит к скачкообразному изменению скорости ведущей волны.

Поскольку время индукции за фронтом внутренней волны будет намного меньше времени индукции за ведущим ударным фронтом, реакцию за фронтом внутренней волны будем считать мгновенной. После выхода внутренней волны произойдет «срыв» реакции и начнется раз-

ния можно записать в виде неравенства

$$1 < \int_{r_1}^{r_3} \frac{dr}{D\tau_\phi}, \quad (3)$$

которое должно выполняться при $0 \leq r_1 < \infty$.

Поскольку начиная с t_1 и до истечения периода индукции полная энергия за фронтом не меняется, то изменение скорости ведущей ударной волны на этом участке будем описывать зависимостью, соответствующей сильному точечному взрыву в инертной среде [13]

$$\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 = D^2 = D_1^2 (r_1/r)^\nu, \quad r_1 \leq r \leq r_3. \quad (4)$$

В [14] численным расчетом показано, что при размере зоны индукции, на порядок меньшем радиуса волны, значение интеграла в правой части (3) с погрешностью, не превышающей 10%, можно рассчитать, заменяя параметры в частице параметрами на фронте в соответствующий момент времени. Оценки показывают (в околокритическом режиме в точке разделения скорость близка к D_0), что к моменту спада волны до параметров, соответствующих третьему пределу самовоспламенения, длина зоны индукции существенно меньше радиуса волны. Поэтому в дальнейшем при вычислении интеграла заменим параметры в частице на параметры на фронте. При этом температура и плотность в частице становятся функциями только скорости фронта ведущей волны D . Тогда, используя (2) и (4) и переходя в (3) к интегрированию по $\omega = E_a/RT$, получим

$$\nu AD_1 \left(\frac{\rho_a}{\rho_1}\right)^n \frac{E_a}{RT_1} \frac{d(\ln T_1)}{d(\ln D_1^2)} < r_1 \int_{E_a/RT_1}^{E_a/RT_3} \exp(-\omega) \varphi(\omega) d\omega, \quad (5)$$

$$\text{где } \varphi(\omega) = \frac{rD_1 T (\rho)^n d(\ln T_1)/d(\ln D_1^2)}{r_1 D T_1 (\rho_1)^n (\ln T)/d(\ln D^2)}.$$

Для всех практически используемых смесей $E_a \geq 18000$ ккал/моль, $T_3 \leq 1000$ К, $T_1 \approx T_{10} \approx 1500 \div 2000$ К. Анализ показывает, что $(\omega/\omega_1)^{1/\nu-1/2} < \varphi(\omega) < (\omega/\omega_1)^{1/\nu}$. Все это позволяет вычислить значение интеграла в (5) с точностью не хуже $(25/\nu)\%$ в виде

$$\int_{E_a/RT_1}^{E_a/RT_3} \exp(-\omega) \varphi(\omega) d\omega \approx \exp(-\omega_1) = \exp(-E_a/RT_1).$$

Тогда из (5) получаем

$$r_1 > \nu AD_1 \left(\frac{\rho_a}{\rho_1}\right)^n \frac{d(\ln T_1)}{d(\ln D_1^2)} \frac{E_a}{RT_1} \exp \frac{E_a}{RT_1}. \quad (6)$$

Поскольку в момент разделения реакция прошла во всем объеме за фронтом инициирующей волны, величину скорости (D_1) ведущего ударного фронта в точке разделения (справа от r_1) будем считать равной скорости пересжатой детонационной волны с мгновенной реакцией на фронте, возбужденной точечным источником с энергией E_a . Для приближенного описания профиля скорости такой волны обобщим формулу (2) из [14] при $\lambda = 0$ на случай любой размерности

$$D_1^2 = D_0^2 \left[\frac{4E_a}{(\nu+2)^2 \alpha \rho_0 D_0^2 r_1^\nu} + q(D_1) \right] = D_0^2 [\varepsilon + q(D_1)]. \quad (7)$$

В [14] $Q(D_1)/Q(D_0) = q(D_1) \equiv 1$. Расчет [15] показывает, что тепловой эффект реакций сильно зависит от скорости пересжатой детонационной

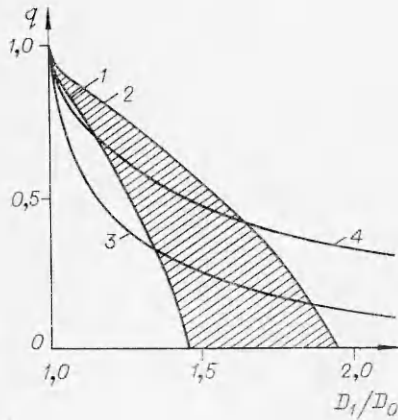


Рис. 2. Зависимость тепловыделения за фронтом ударной волны от скорости пересжатой детонационной волны.

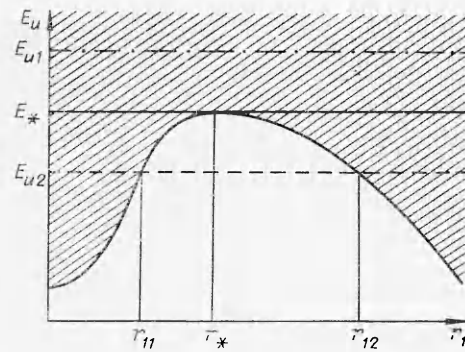


Рис. 3. Графики к неравенству (10).

волны (графики зависимости $q(D_1)$ из [15] ограничены кривыми 1, 2 и для всех смесей лежат в заштрихованной области рис. 2).

Формула (7) при $q(D_1) = 1$ будет давать завышенное значение D_1 . Учесть влияние зависимости тепловыделения от степени пересжатия детонационной волны можно с помощью простой зависимости

$$D_1^2 = D_0^2 (\varepsilon + 1)^{1/l}. \quad (8)$$

При $l > 1$ для любого r_1 (8) дает меньшее значение скорости, чем при $l = 1$, соответствующем (7) с $q_1(D_1) = 1$, что эквивалентно уменьшению эффективности тепловыделения по сравнению с $q(D_1) = \text{const}$. Причем соотношение (8) для любого l при достаточно малых r_1 мало отличается от решения задачи о сильном точечном взрыве в инертной среде, которое в таких условиях справедливо и для реагирующей смеси, а при $r_1 \rightarrow \infty$ величина скорости стремится также к правильному значению \bar{D}_0 .

Алгебраическим преобразованием (8) можно привести к виду

$$D_1^2 = D_0^2 \left\{ \varepsilon + \left[\left(\frac{D_1}{D_0} \right)^2 - \left(\left(\frac{D_1}{D_0} \right)^{2l} - 1 \right)^{1/l} \right] \right\}.$$

Сравнивая это выражение с (7), получим некоторую формальную зависимость тепловыделения от скорости волны

$$q(D_1) = \left\{ (D_1/D_0)^2 - [(D_1/D_0)^{2l} - 1]^{1/l} \right\}. \quad (9)$$

Рис. 2 показывает, что, подбирая l , соотношение (9) можно достаточно хорошо согласовать с расчетной зависимостью для выбранной смеси (кривая 3 соответствует $l = 2$, кривая 4 — $l = 3/2$). Таким образом, варьируя l в (8), можно учесть влияние изменения теплового эффекта реакции за счет смещения химического равновесия за фронтом на движение пересжатой детонационной волны от точечного взрыва.

Подстановка (8) в (6) дает неравенство, связывающее E_u и r_1 . Для упрощения анализа рассмотрим приближение сильной ударной волны: $\rho_1 \approx (\gamma + 1)/(\gamma - 1) \cdot \rho_0$ и $\bar{T}_1 \approx T_0 \frac{2\gamma(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)^2} M_1^2 = \text{const} D_1^2$. Тогда для $\nu = 2$ из (6) получим

$$E_u > C_1 \exp \left(\frac{C_2 r_1^2}{C_3 E_u + r_1^2} - C_4 r_1^2 \right), \quad C_1, C_2, C_3, C_4 - \text{const}. \quad (10)$$

На рис. 3 показано решение этого неравенства. Область, в которой оно выполняется (на рис. 3 заштрихована), отделена кривой с максимумом

E_* в некоторой точке r_* . Видно, что при энергии источника инициирования $E_u > E_*$ неравенство выполнено при любом r_1 , т. е. период индукции будет конечным для частицы, пересекшей фронт ведущей волны в момент разделения, при каком бы r_1 разделение ни произошло. Источник с такой энергией будет возбуждать во взрывчатой смеси самоподдерживающуюся детонационную волну.

При $E_u < E_*$, существуют такие r_1 , принадлежащие интервалу $r_{11}(E_u) \leq r_1 \leq r_{12}(E_u)$, при которых неравенство не выполняется, и если разделение произойдет при r_1 из этого интервала, то период индукции для частицы, пересекшей фронт волны в момент такого разделения, не истечет за конечное время. Это означает, что если при энергии источника инициирования $E_u < E_*$ разделение произойдет в указанном интервале, то в результате срыва химической реакции ударная волна, лишенная поддержки, будет затухать.

Таким образом, E_* имеет смысл критической энергии точечного инициирования газовой детонации. Параметры, соответствующие $E_u = E_*$, будем называть также критическими. Рис. 3 показывает также, что r_* и E_* могут быть найдены, если при замене знака неравенства на равенство в (10) одновременно приравнять нулю производную от правой части по r_1 .

При учете точных параметров на фронте ударной волны качественное поведение неравенства (6) не меняется и остается подобным (10) для любой размерности v . Тогда, заменяя в (6) знак неравенства на равенство и дифференцируя функцию в неявном виде, имеем для r_* и E_* следующую систему уравнений:

$$r_* = vAD_* \left(\frac{\rho_a}{\rho_*} \right)^n \frac{d(\ln T_*)}{d(\ln D_*^2)} \frac{E_a}{RT_*} \exp \left(\frac{E_a}{RT_*} \right), \quad (11)$$

$$1 = \frac{\partial}{\partial r_1} \left[vAD_1 \left(\frac{\rho_a}{\rho_1} \right)^n \frac{d(\ln T_1)}{d(\ln D_1^2)} \frac{E_a}{RT_1} \exp \left(\frac{E_a}{RT_1} \right) \right] \Big|_{r_1=r_*}. \quad (12)$$

После дифференцирования в (12) и подстановки (11), получим

$$\begin{aligned} \frac{d(\ln D_1^2)}{d(\ln r_1)} \Big|_{r_1=r_*} = & - \left\{ \frac{d(\ln T_1)}{d(\ln D_1^2)} \left(\frac{E_a}{RT_1} + 1 \right) + n \frac{d(\ln \rho_1)}{d(\ln D_1^2)} - \right. \\ & \left. - \frac{d}{d(\ln D_1^2)} \left[\ln \frac{d(\ln T_1)}{d(\ln D_1^2)} - \frac{1}{2} \right] \right\}^{-1} \Big|_{r_1=r_*}. \end{aligned}$$

Введем обозначения: $\frac{d(\ln T_1)}{d(\ln D_1^2)} = \beta_T$, $\frac{d(\ln \rho_1)}{d(\ln D_1^2)} = \beta_\rho$ и $\frac{d(\ln \beta_T)}{d(\ln D_1^2)} = \beta'_T$,

и после подстановки D_1 из (9) и дифференцирования получим

$$\frac{\varepsilon_*^l + 1}{\varepsilon_*^l} = v \left[\beta_{T_*} \left(\frac{E_a}{RT_*} + 1 \right) + n\beta_{\rho_*} - \beta'_{T_*} - \frac{1}{2} \right]. \quad (13)$$

Здесь β_{T_*} , T_* , β_{ρ_*} , β'_{T_*} — функции D_*^2 и, следовательно, функции ε_* , т. е. (13) является уравнением для ε_* , которое решалось численно. В результате установлено, что для смесей с $E_a/RT_{10} \geq 5$ величина $\varepsilon_*^l \leq 0,2$. Это позволяет найти приближенное решение уравнения (13) и получить следующие простые аналитические формулы для расчета r_* и E_* :

$$\begin{aligned} \bar{r} = \frac{\gamma_0 + \gamma_{10}}{2}, \quad \beta_{10} = \frac{1}{1 + 2/(\gamma - 1) M_{10}^2}, \quad \varepsilon_* = \left(v\beta_{10} \frac{E_a}{RT_{10}} - 1 \right)^{-1/l}, \\ D_* = D_0 (1 + \varepsilon_*^l / 2l), \end{aligned} \quad (14)$$

$$T_* = T_{10} (1 + \beta_{10} \varepsilon_*^l / l),$$

$$r_* = \nu A D_* \beta_{10} \left(\frac{\rho_a}{\rho_{10}} \right)^n \frac{E_a}{RT_*} \exp \left(\frac{E_a}{RT_*} \right),$$

$$E_* = \frac{(\nu + 2)^2}{4} \alpha \varepsilon_* \rho_0 D_0^2 r_*^\nu.$$

Для расчета по формулам (14) нужно знать параметры на фронте ударной волны, движущейся со скоростью D_0 , и формулу для периода индукции. Для смесей, у которых зависимость $q(D_1)$ близка к кривой 1 или 2 рис. 2, следует выбирать $l=2$ или $l=3/2$ соответственно.

Критическое время (время выхода инициирующей волны на r_*) находится при интегрировании зависимости для скорости, определяемой (9), т. е.

$$D = D_0 \{ [\varepsilon_* (r_*/r)^\nu]^l + 1 \}^{1/2l} \quad \text{или} \quad t_* = r_* \varepsilon_* / D_0 \cdot I_{\nu l}(\varepsilon_*),$$

где $I_{\nu l}(\varepsilon_*) = \int_0^{\varepsilon_*^{-1/\nu}} \frac{dx}{(x^{-\nu l} + 1)^{1/2l}}$. Значения интегралов $I_{\nu l}$ при $l=2$ приведены на рис. 4.

Из расчетов по рассматриваемой модели следует, что зависимость скорости ведущей ударной волны от расстояния в околокритических режимах будет такой, как представлено на рис. 5, а ($\nu=3$, смесь с $M_0=6$, $\varepsilon_* = 1/4$ и $l=2$). При $E_u = 1,01 E_*$ на участке движения волны от 0 до r_* регистрируются пульсации скорости малой амплитуды, после r_* скорость спадает до минимальной величины порядка $0,5 D_0$ ($r_{\min} \approx 1,5 r_*$), $M_{\min} \approx 3,3$), затем протяженность и амплитуда пульсаций сокращаются, и при $r \geq 3 r_*$ величина скорости ведущей волны незначительно отклоняется от D_0 . При $E_u < E_*$ скорость волны после нескольких пульсаций малой амплитуды на участке $r < r_*$ спадает, асимптотически приближаясь к скорости звука. Если E_u больше критический уже на 10—20%, протяженность и амплитуда пульсаций вблизи r_* резко сокращаются. Волна из пересжатой выходит на стационарный режим с пульсациями небольшой амплитуды.

Для смесей с $\varepsilon_* < 1/4$ (например, стехиометрические смеси углеводородов основного ряда с воздухом) зона пульсаций и их амплитуда сокращаются, а при $\varepsilon_* > 1/4$ (например, смесь $2C_2H_2 + 5O_2$) увеличиваются. При уменьшении размерности задачи ($\nu=2, 1$) зона пульсаций в относительных координатах (r/r_*) растягивается. В реальных волнах в околокритическом режиме как на начальном участке, так и при $r \geq 3r_*$ вероятнее всего будет развиваться многофронтная структура, а при сверхкритическом режиме $E_u > 1,5 E_*$ вместо одномерных пульсаций везде будет регистрироваться многофронтная структура.

Сравнение модели с экспериментом

Существующий экспериментальный материал по инициированию газовой детонации из-за недостатка информации далеко не всегда позволяет провести непосредственное сравнение экспериментальных данных с разработанной моделью. В частности, для правильной оценки критической энергии инициирования важно знать пространственно-временные характеристики энерговыделения и КПД установок.

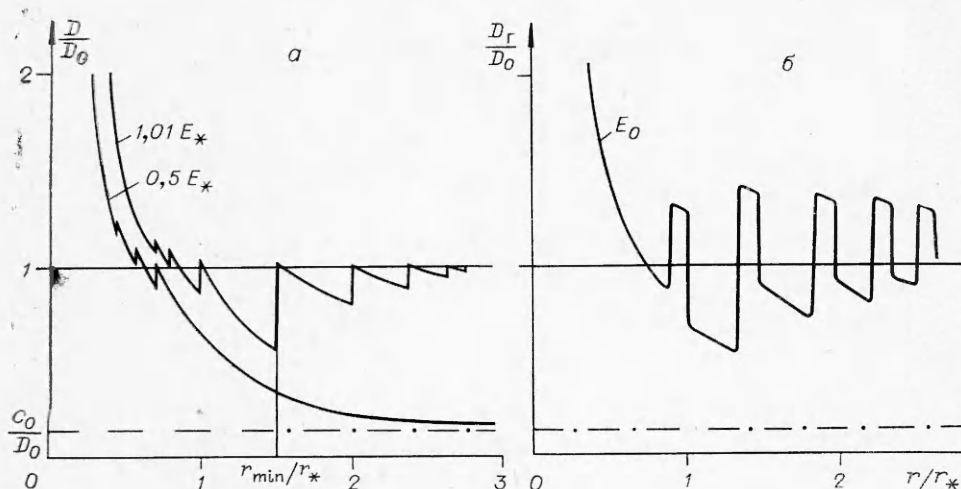


Рис. 5. Зависимость скорости ведущего фронта инициирующей волны от расстояния при различных энергиях источника инициирования (а) и скорости фронта горения инициирующей волны от расстояния (б).

Критический обзор всех доступных материалов сделан в [6], поэтому в настоящей работе сравнение проводится только с теми экспериментами, которые не требуют дополнительных предположений, либо с единственными в своем роде экспериментами. Все данные по расчетам стационарных детонационных волн взяты из [15], значения α — из [16].

Отдельно следует остановиться на выборе выражения для периода индукции. Существующие в литературе формулы для расчета периода индукции получены при довольно низких абсолютных концентрациях горючего и окислителя. Поэтому расчет по таким формулам при параметрах, соответствующих детонационной волне при атмосферном давлении, в особенности для неразбавленных стехиометрических смесей, является сильной (несколько порядков) экстраполяцией. Вследствие этого даже небольшая неточность в определении концентрационной зависимости может привести к большой погрешности при расчете критической энергии ($E_* \sim \tau^v$), что делает совершенно непригодными для расчета те формулы, которые получены при малом варьировании концентрации и температуры.

К сожалению, ни в одной из доступных работ по измерению периода индукции в ацетилено-кислородных смесях не проводилось отдельное определение зависимостей периода индукции от концентрации смеси и от температуры.

Концентрационная зависимость по существовавшей ранее традиции выбиралась так, чтобы период индукции был обратно пропорционален первой степени общей концентрации (плотности) смеси, хотя в [17] указывалось, что экспериментальные данные с большей точностью описываются функциями типа $\tau \sim \rho^{-n}$, где $n < 1$. При расчетах в настоящей работе для ацетилено-кислородных и водородно-кислородных смесей использованы формулы из [17—19]:

$$\tau = 3,38 \cdot 10^{-11} [\text{O}_2]^{-1/2} [\text{C}_2\text{H}_2]^{-1/2} \exp(17\,400/RT) \text{ моль} \cdot \text{с/л}, \quad (15)$$

$$\tau = 4,17 \cdot 10^{-11} [\text{O}_2]^{-1/2} [\text{H}_2]^{-1/2} \exp(18\,400/RT) \text{ моль} \cdot \text{с/л}. \quad (16)$$

В [17] приводятся абсолютные концентрации, при которых производились эксперименты, что позволяет скорректировать предлагаемую в [17] формулу, выбирая вместо $n = 1$, $n = 0,8$

$$\tau = 1,74 \cdot 10^{-10} [\text{O}_2]^{-0,8} \exp(17\,060/RT) (\text{моль/л})^{0,8} \cdot \text{с}. \quad (17)$$

В [19] измерялась задержка воспламенения за отраженной волной. При использовании такой методики измерения проводятся при больших

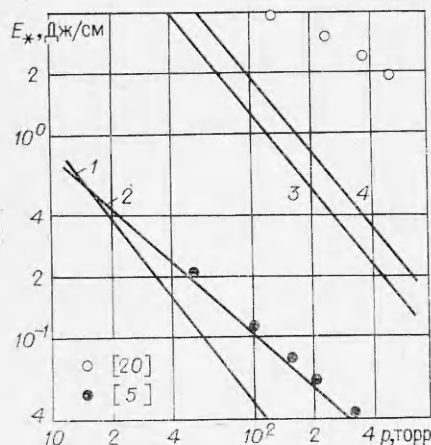


Рис. 6. Зависимость критической энергии иницирования от начального давления смеси, $\nu=2$.
Смесь $2C_2H_2+5O_2$: 1, 2 — расчет по (15) и (17); смесь $2H_2+O_2$: 3, 4 — расчет по (16) и (18).

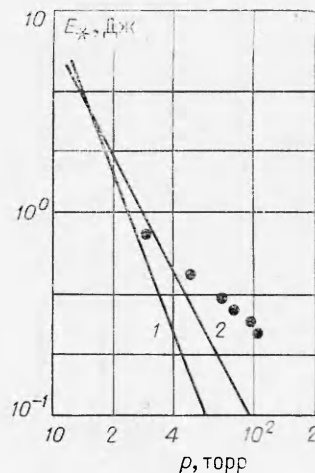


Рис. 7. Зависимость критической энергии иницирования от начального давления смеси $2C_2H_2+5O_2$, $\nu=3$.
1, 2 — расчет по (15) и (17); точки — эксперимент [4].

концентрациях смеси, что уменьшает диапазон экстраполяции и соответственно погрешность расчета

$$\tau = 6,9 \cdot 10^{-11} [O_2]^{-1} \exp(16\,328/RT) \text{ моль} \cdot \text{с/л.} \quad (18)$$

На рис. 6 приведены расчетные зависимости критической энергии от начального давления для смесей $2H_2 + O_2$ и $2C_2H_2 + 5O_2$ при цилиндрическом иницировании. Здесь же приведены экспериментальные данные по цилиндрическому иницированию детонации электрическим разрядом в этих смесях из [5 и 20].

В экспериментах [20] (смесь $C_2H_2 + 2,5O_2$) измерялась энергия, выделяющаяся непосредственно на разрядном промежутке. Расхождение расчета с экспериментом при использовании (15), особенно заметное на высоких давлениях, объясняется неточностью определения концентрационной зависимости в [18] — $n=1$. Расчет с использованием (17) находится в хорошем соответствии с экспериментом.

К сожалению, в [5] полностью отсутствует информация об условиях, в которых получены данные по иницированию детонации в смеси $2H_2 + O_2$, что существенно снижает их ценность. Как показывает рис. 6, отличие расчета и эксперимента [5] уменьшается при использовании формулы (18), это означает, что для смеси $2H_2 + O_2$ также $n < 1$. Остающееся большое различие на высоких давлениях и в особенности слабая зависимость от начального давления ($E_* \sim p_0^{-0,5}$) скорее всего объясняются особенностями эксперимента (неточность иницирования, КПД установки).

Зависимость критической энергии от начального давления для смеси $2C_2H_2 + 5O_2$ в сферическом случае и экспериментальные данные [4] по иницированию детонации в этой смеси лазерным разрядом приведены на рис. 7. Расхождение расчета и экспериментов при высоких давлениях, даже при $n=0,8$, объясняется, по-видимому, тем, что иницирование становилось неточным (r_* с увеличением давления уменьшается, а размер зоны фокусировки остается неизменным).

При расчете критической энергии для метановых и пропановых смесей использовались формулы из [21] и [22] соответственно

$$\tau = 2,5 \cdot 10^{-15} [CH_4]^{0,32} [O_2]^{-1,02} \exp(53\,000/RT) (\text{моль/л})^{0,7} \cdot \text{с}, \quad (19)$$

$$\tau = 4,4 \cdot 10^{-14} [C_3H_8]^{0,57} [O_2]^{-1,22} \exp(42\,200/RT) (\text{моль/л})^{0,65} \cdot \text{с}. \quad (20)$$

В работе [23] экспериментально исследовалась зависимость минимальной энергии инициирования детонации в метано-кислородных смесях от степени разбавления азотом. Отсутствие расчетов стационарных детонационных волн во всем диапазоне экспериментов из [23] не позволяет провести полного сравнения.

В [15] расчет проведен для $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$ и для метано-воздушной смеси, для которых в [23] приводятся только экстраполированные данные по энергии инициирования. Однако при изменении состава от метано-воздушной смеси до $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 + 5,5\text{N}_2$ (крайняя экспериментальная точка [23]) скорость меняется всего на 4% (от 1800 до 1880 м/с [23]), что позволяет, имея значения параметров стационарной волны в метано-воздушной смеси, с хорошей точностью оценить те же параметры для $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 + 5,5\text{N}_2$.

Для сравнения с экспериментами [23–25] по инициированию газовой детонации твердыми ВВ энергетический эквивалент для тетрила выбирался 4,8 МДж/кг [26]. Для смесей $\text{CH}_4 + \text{воздух}$, $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 + 5,5\text{N}_2$, $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{воздух}$ при $p_0 = 1$ атм расчет дает критическую массу ВВ 28 кг, 600 и 50 г соответственно. Для этих же смесей экстраполяция экспериментов [23] дает 22 кг тетрила, а эксперимент [23, 24] — 520 и 80 г соответственно. В случае смеси $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$ расчет дает 260 мг, а экстраполированные данные [23] — 25 мг. Это различие может быть следствием как большой экстраполяции эксперимента (два порядка по энергии), так и экстраполяции по концентрации в формуле для периода индукции.

Сильное отличие экспериментальных данных [25] (1 кг ТНТ для метано-воздушной смеси) от данных [23] может объясняться различием чистоты используемого метана. Так, в работе [27] показано, что добавка к чистому метану ~5% углеводородов (C_2H_6 , C_3H_8) приводят к уменьшению периода индукции в 2–3 раза и соответственно критической энергии в 8–27 раз, что и объясняет полученное различие (в [23] использовался очищенный метан, а в [25] — технический, который всегда содержит высокомолекулярные фракции и даже водород).

Проведенное сопоставление показывает, что при использовании формул для периода индукции с отдельно определенной концентрационной зависимостью [21, 22] расчеты хорошо согласуются с экспериментом.

Если при расчете использовать формулы вида $\tau \sim \rho^{-1}$, результаты совпадают с экстраполяцией эксперимента по инициированию в области концентраций, при которых измерялись периоды индукций, и расходятся при экстраполяции периода индукции в область, где измерялась энергия инициирования. На этом основании можно утверждать, что концентрационная зависимость для смесей $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ и $2\text{C}_2\text{H}_2 + 5\text{O}_2$, как и для смесей из [21, 22], где проводилось отдельное определение зависимости периода индукции от температуры и концентрации, имеет показатель $n < 1$. В частности, для $2\text{C}_2\text{H}_2 + 5\text{O}_2$, согласно разработанной модели и экспериментам [20], $n = 0,8$. Рассчитанные по (17)–(20) значения

| Смесь | E_* | r_* |
|--|--|--------------------|
| $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ | 0,4; 0,16; 0,1 | 0,05; 0,14; 0,23 |
| $2\text{C}_2\text{H}_2 + 5\text{O}_2$ | 0,16; 0,003; 0,0013 | 0,009; 0,012; 0,02 |
| $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$ | 11; 98; $1,5 \cdot 10^3$ | 1,2; 3,2; 5,1 |
| $\text{H}_2 + \text{воздух}$ | 0,6; 0,95; 2,8 | 0,14; 0,47; 0,88 |
| $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{воздух}$ | 0,69; 0,67; 1,3 | 0,11; 0,31; 0,57 |
| $\text{CH}_4 + \text{воздух}$ | 150; $8,4 \cdot 10^4$; $8,5 \cdot 10^7$ | 66; 200; 340 |

Примечание. Значения E_* (в Дж см², Дж/см и Дж) и r_* (в см) даны для $\nu=1, 2, 3$ соответственно.

критических радиусов и критических энергий для некоторых смесей при $p_0 = 1$ атм приведены в таблице.

В работе [2] при инициировании детонации в пропано-кислородных смесях твердым ВВ непрерывно измерялась скорость инициирующей волны с помощью микроволнового интерферометра. При этом обнаружены существенные пульсации скорости во фронте инициирующей волны. В частности, в близких к критическому режимах скорость волны падала в минимуме до величины порядка $0,5D_0$ и выходила на значение D_0 лишь после нескольких пульсаций большой амплитуды, что качественно соответствует предлагаемой модели (см. рис. 5, а). Соответствие становится практически полным, если учесть, что микроволновый интерферометр регистрирует скорость фронта горения, а не фронта ударной волны. Качественная зависимость скорости фронта горения от расстояния для $E_u = 1,01E_*$ приведена на рис. 5, б.

Модель [6] построена с учетом неоднородностей реальной волны, что позволяет ей с хорошей точностью предсказывать величину критической энергии. Значения E_* из [6] находятся в хорошем согласии с расчетами настоящей работы.

Подводя итог, сформулируем основные результаты:

1. Построена замкнутая теоретическая модель прямого инициирования газовой детонации при точечном выделении энергии для случая любой размерности задачи ($\nu = 1, 2, 3$) с учетом неустойчивости детонационной волны, имеющая аналитическое решение.

2. Получены приближенные формулы, позволяющие достаточно просто рассчитать все параметры критического режима инициирования, в частности, критическую энергию с точностью около 30%. Исходные данные для расчета: параметры газа на ударном фронте гладкой стационарной волны Чепмена — Жуге и экспериментально определяемые формулы для расчета периода индукции.

3. Движение инициирующей волны на участках, близких к точке минимума скорости, в режимах, близких к критическому, характеризуется сильными пульсациями скорости ударного фронта и фронта горения.

4. Зависимость периода индукции от плотности смеси для ацетиленокислородной смеси, согласно разработанной модели и экспериментам [19], имеет вид $\tau \sim \rho^n$, где $n = 0,8$, а не $n = 1$, как считалось до сих пор.

Все основные качественные и количественные результаты разработанной модели находятся в хорошем соответствии с имеющимся экспериментом. Для полной и всесторонней проверки модели необходимы дальнейшие целенаправленные эксперименты. Для практического применения результатов модели важно получить точные данные по времени индукции, а основное значение имеет точное определение концентрационной зависимости.

В заключение автор выражает благодарность Ю. А. Николаеву, А. А. Васильеву и М. Е. Топчияну за полезное обсуждение.

Поступила в редакцию
22/III 1979

ЛИТЕРАТУРА

1. Я. Б. Зельдович, С. М. Когарко, Н. Н. Симонов. ЖТФ, 1956, 26, 8.
2. O. H. Edwards, G. Hooper, J. M. Morgan. Acta Astr. 1976, 3, 1—2.
3. M. Sichel. Acta Astr., 1977, 4, 3—4.
4. C. G. Bach, N. Knystautas, J. H. Lee. 13-th Symp. (Intern.) on Combustion, Pittsburgh, 1974.
5. J. H. Lee, K. Ramamurthi. Combustion and Flame, 1976, 27, 3.
6. А. А. Васильев, Ю. А. Николаев, В. Ю. Ульяницкий. ФГВ, 1979, 15, 6.
7. В. Р. Коробейников, V. A. Levin et al. Acta Astr., 1972, 17, 5—6.
8. В. А. Левин. Докт. дис. М., 1975.
9. В. А. Feay, J. R. Bowen. Comb. and Flame, 1973, 20, 1.

10. J. W. Meyer, A. K. Oppenheim. 14-th Symp. (Intern.) on Combustion, 1972.
11. S. Taki, T. Fujiwara. 14-th Symp. (Intern.) on Combustion, 1972.
12. Е. С. Щетинков. Физика горения газов. М., Наука, 1965.
13. Л. И. Седов. Методы подобия и размерности в механике. М., Наука, 1972.
14. А. А. Васильев, Ю. А. Николаев. ФГВ, 1976, 12, 5.
15. Ю. А. Николаев, М. Е. Топчийн. ФГВ, 1977, 13, 3.
16. В. П. Коробейников. Задачи теории точечного взрыва в газах. М., Наука, 1973.
17. G. P. Glass, G. B. Kistiakowsky et al. J. Chem. Phys., 1965, 42, 2.
18. D. R. White. 14-th Symp. (Intern.) on Combustion, Berkeley, 1966.
19. R. A. Strehlow, R. E. Maurer, S. Rajan. AIAA J., 1965, 7, 2.
20. J. L. Lee, H. Matsui. Combustion and Flame, 1977, 28, 1.
21. T. Tsuboi, H. G. Wagner. 15-th Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh, 1974.
22. A. Burcat, A. Lifshitz et al. 13-th Symposium (Intern.) on Combustion, Pittsburgh, 1971.
23. O. C. Bull, J. E. Elsworth et al. Appl. Phys., 1976, 9.
24. VI Международный коллоквиум по газодинамике взрыва и реагирующих систем. ФГВ, 1978, 14, 4.
25. С. М. Когреко, В. В. Адушкин, А. Г. Лямин. НТПГВ, 1965, 1, 2.
26. Ф. А. Баум и др. Физика взрыва. М., Наука, 1975.
27. R. W. Crossley, E. R. Doroko et al. Comb. and Flame, 1972, 19, 3.

РАСЧЕТ КРИТИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ ТЕПЛООВОГО ВЗРЫВА СИСТЕМ ГАФНИЙ — БОР И ТАНТАЛ — УГЛЕРОД НА ОСНОВЕ ДИАГРАММ СОСТОЯНИЙ

Е. А. Некрасов, Ю. М. Максимов, А. П. Алдушин

(Томск)

Взаимодействие в системах металл — металл, металл — неметалл может описываться на основе представлений реакционной диффузии и определяться диаграммами состояний этих систем [1—6]. Анализ различных неизотермических процессов в таких системах (в предположении о наличии локального термодинамического равновесия) заключается в совместном решении уравнений теплопроводности с соответствующей диффузионной задачей, вид которой диктуется фазовой диаграммой. Таким образом, реализуется определенный методологический подход к описанию неизотермического взаимодействия в конденсированных системах: фазовая диаграмма — теплофизическая обстановка — макрокинетика различных процессов.

В данной работе указанный подход применяется к задаче о воспламенении частиц или нитей металлов IV группы, покрытых слоем бора, и частиц металлов V группы с углеродом. Тип фазовой диаграммы внутри каждой группы остается неизменным. Конкретные расчеты проводились на примерах систем гафний — бор и тантал — углерод (рис. 1).

При решении задачи исходим из следующих допущений: 1) влиянием кривизны на процесс диффузии при разогреве пренебрегается в силу малости толщин слоев образующихся фаз по сравнению с радиусом частицы в момент воспламенения; 2) начальная толщина пленки продуктов не учитывается; 3) объем реагирующей системы считается неизменным; 4) образование твердых растворов не учитывается ввиду очень незначительной растворимости неметалла в металле (см. рис. 1, а, б). В этом случае уравнение теплового баланса, определяющее температуру реагирующей системы, можно записать в виде [8, 9].

$$C_T dT/dt = S [\Phi(T, \delta_1, \delta_2) - \alpha(T - T_0) - \varepsilon_0 \sigma (T^4 - T_0^4)]. \quad (1)$$

Здесь $C_T = c_V V$, c_V — теплоемкости (суммарная и единицы объема системы); V, S — полный объем и поверхность системы; T_0, T — начальная