

4. А. Г. Иванов, Г. Я. Карпенко. ФГВ, 1980, 16, 2.
5. E. Wlodarczyk. Bull. Acad. pol. sci. Sér. sci. techn., 1979, 27, 12.
6. В. С. Соловьев, Л. Н. Власова, С. Г. Андреев. Тр. МВТУ, № 358. М., 1981.
7. Я. Б. Зельдович, А. С. Компанец. Теория детонации. М.: Гостехиздат, 1955.
8. М. М. Бойко, В. Н. Крамаренко, В. С. Соловьев. — В кн.: Химическая физика процессов горения и взрыва. Детонация. Черноголовка, 1977.
9. В. С. Соловьев, А. В. Аттетков, М. М. Бойко. Тр. МВТУ, № 340. М., 1980.
10. В. С. Соловьев, В. Н. Крамаренко, А. И. Чернов и др. ФГВ, 1981, 17, 6.
11. Л. Д. Ландау, К. П. Станюкович. Докл. АН СССР, 1945, 46, 9.
12. А. Ф. Барышников, В. Ю. Кайнов, Э. Э. Лин и др. ФГВ, 1979, 15, 6.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ДЕТОНАЦИИ В ГАЗОВОМ СЛОЕ ГРЕМУЧЕЙ СМЕСИ, РАЗБАВЛЕННОЙ АЗОТОМ

М. Ф. Иванов, Ю. Н. Шебеко, А. Я. Корольченко

(Балашиха)

Изучение распространения детонационных волн в газовых объемах конечной толщины представляет как теоретический, так и практический интерес в связи с необходимостью обеспечения взрывобезопасности технологических процессов. Одна из наиболее интересных качественных особенностей детонационных процессов в зарядах конечных размеров — наличие срывных явлений, вызванных боковой разгрузкой продуктов детонации, что приводит к пульсирующему режиму ее развития и в конечном счете определяет критический размер заряда. Данное явление обнаружено экспериментально как для жидких веществ [1, 2], так и для газовых смесей [3, 4].

В работе [5] проведено численное моделирование развития двумерной детонационной волны в газовых объемах конечной толщины. Исследовано распространение детонационной волны в газовом слое гремучей смеси, который с одного края граничит с твердой нетеплопроводной стенкой, а с другого — с химически инертным газом, имеющим те же физические свойства, что и исходная смесь (рис. 1). Найдена величина критической толщины газового слоя $\delta_{кр}$, при которой еще возможно стационарное распространение детонации.

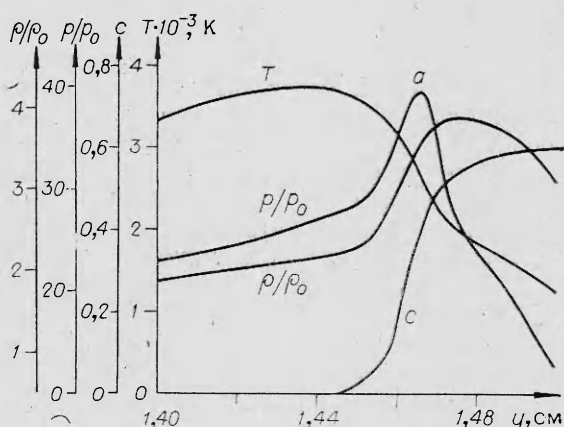
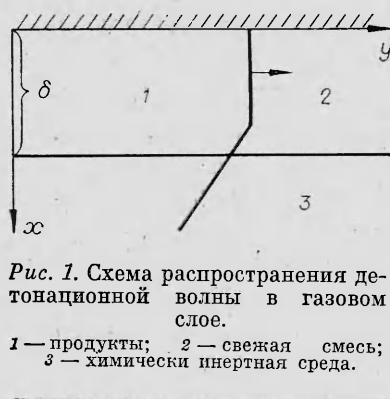
В настоящей работе проделан численный расчет распространения двумерной детонационной волны в разбавленной азотом гремучей смеси. Геометрия задачи показана на рис. 1. Методика расчета подробно изложена в [5]. Процесс детонации исследуется совместным решением уравнения химической кинетики и уравнений газовой динамики в лагранжевом описании.

Для описания химической кинетики используем полуэмпирическое выражение

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -A\rho \exp(-E/RT), \quad (1)$$

где c — относительная концентрация гремучей смеси ($0 \leq c \leq 1$); ρ , T — плотность и температура газа; A , E — предэкспоненциальный фактор и энергия активации (см. [5]), их величины подобраны таким образом, чтобы правильно описывать экспериментальную зависимость периода индукции самовоспламенения гремучей смеси от температуры [6].

Использована вычислительная схема типа предиктор — корректор [7]. Типичный размер счетной ячейки — 0,02 см в продольном и 0,1 см в поперечном направлении. Величина шага интегрирования по времени составляла $2 \cdot 10^{-9}$ с, эволюция детонационной волны наблюдалась до момента времени ≈ 20 —30 мкс. Расчеты проводили на ЭВМ ЕС-1033, время расчета одного варианта 8—10 ч.

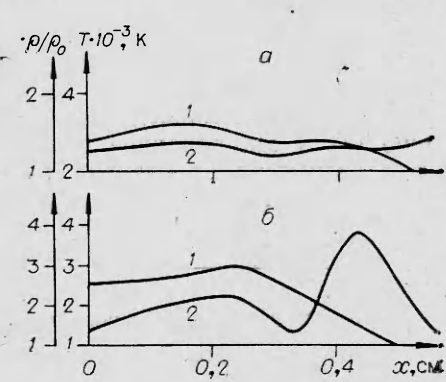
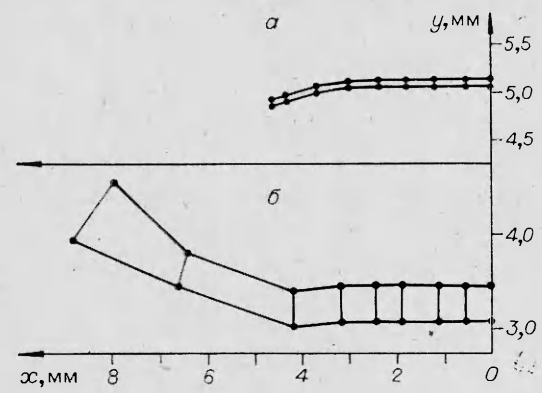


Начальная температура предполагалась равной 300 К, начальное давление $p_0 = 100$ кПа, показатель адиабаты $\gamma = 1,4$. Разбавление гремучей смеси азотом учитывалось следующим образом:

- 1) изменяются начальная плотность и тепловой эффект реакции на единицу массы исходной горючей смеси;
- 2) используется то же уравнение химической кинетики, что и для неразбавленной гремучей смеси, но начальная концентрация гремучей смеси при этом соответственно уменьшается.

Детонационная волна возбуждалась мгновенным выделением энергии в области протяженностью ~ 1 см и толщиной δ . Величина энерговыделения составляла от 1 до 220 Дж в зависимости от начальной концентрации гремучей смеси и обеспечивала уверенное инициирование детонационной волны, которая затем в зависимости от δ либо выходила на стационарный режим, либо затухала.

На рис. 2 приведены типичные продольные профили гидродинамических параметров детонационной волны в стационарном режиме. В области химического пика (точка *a*) скорость реакции близка к максимуму. Плотность газа (ρ_0 — начальная плотность, ρ — плотность) достигает максимального значения до момента начала интенсивной химической реакции, поскольку причиной ее начала является адиабатический нагрев горючей смеси ударной волной. Температура имеет максимум за хими-



ческим пиком, т. е. там, где реакция практически полностью завершена.

На рис. 3 представлена картина деформации в начале прямоугольных лагранжевых ячеек газа в процессе распространения детонационной волны. Если вблизи химического пика ячейки практически плоские, то в области за пиком за счет бокового разлета продуктов реакции ячейки существенно деформируются. При этом вначале плоский слой газа оказывается выгнутым вперед за счет давления расширяющихся продуктов сгорания за фронтом детонационной волны.

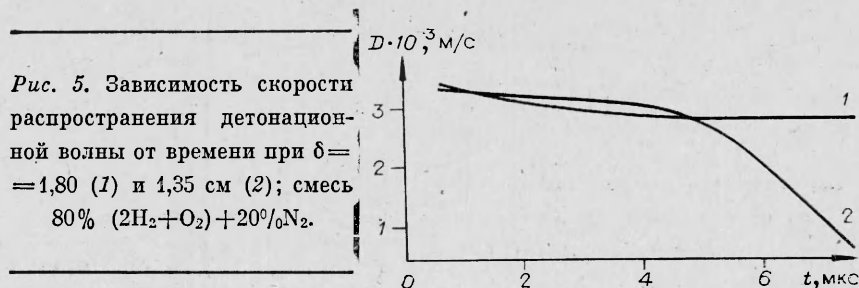
На рис. 4 показаны типичные поперечные профили температуры и плотности. За фронтом детонационной волны температура и плотность относительно слабо изменяются по сечению, а непосредственно во фронте волны изменение ρ значительно. Это обусловлено следующими обстоятельствами.

Распространение детонационной волны при $\delta \approx \delta_{кр}$ происходит неравномерно по сечению газового слоя. Сначала в химической реакции участвуют области газа вблизи $x=0$ и лишь затем реагируют периферийные области газового слоя. В связи с этим вблизи $x=0$ после реакции может идти разгрузка как вбок, так и назад, поскольку за фронтом волны реакция кончилась и давление существенно уменьшилось за счет боковой разгрузки. В то же время в середине газового слоя (при $x \approx \delta/2$) ударная волна еще адиабатически сжимает газ, что и вызывает рост плотности. Этим, по-видимому, объясняется наличие максимума плотности в середине газового слоя (вблизи $x \approx 0,4$, см. рис. 4, б).

Как и в работе [5], обнаружены нестационарные явления при распространении детонационной волны при $\delta \approx \delta_{кр}$. На начальном этапе реализуется достаточно продолжительный квазистационарный режим, характеризующийся медленным сокращением плоского участка фронта детонационной волны. В определенный момент времени наряду с центральной зоной энерговыведения ближе к краю заряда в ударно-сжатом газе возникает новая зона интенсивной реакции. При этом резко возрастает боковая разгрузка, что приводит к погасанию реакции на краю заряда. Это явление может повторяться при дальнейшем распространении волны. Подробное объяснение данного эффекта дано в [5].

Как упомянуто выше, детонационная волна способна к стационарному распространению в газовом слое лишь при достаточно большой толщине. В настоящей работе определены диапазоны значений δ , в которых находятся величины $\delta_{кр}$ при различных степенях разбавления гремучей смеси азотом. За критерий наличия незатухающей детонационной волны принималось постоянство скорости ее распространения D при больших временах. На рис. 5 приведены типичные зависимости D от времени для затухающей детонационной волны. Видно, что для смеси гремучего газа и азота (соотношение 4:1) при $\delta = 1,35$ см происходит затухание, а при $\delta = 1,80$ см — стационарное распространение детонационной волны.

В таблице приведены значения δ , при которых происходит затухание (1) и стационарное распространение детонации в газовом слое (2) в зависимости от степени разбавления гремучей смеси азотом. Здесь же указаны соответствующие энергии инициирования детонации. Эф-



Факт роста $\delta_{кр}$ от степени разбавления гремучей смеси азотом обусловлен увеличением периода индукции самовоспламенения горючей смеси. Скорость боковой разгрузки при этом практически не изменяется.

Представляет интерес сопоставить результаты расчета с экспериментом. Однако опытные данные имеются лишь для неразбавленной

гремучей смеси [3, 4]. В работе [3] найдено, что $\delta_{кр} = 0,5$ см, в [4] $\delta_{кр} > 1,0$ см. В экспериментах [3] горючая смесь и инертная среда были отделены друг от друга тонкой нитроцеллюлозной пленкой толщиной 10 мкм, которая, возможно, влияет на процесс распространения детонационной волны. В [4] опыты по определению $\delta_{кр}$ для гремучей смеси выполнены без применения пленки, и именно эти условия моделировали в настоящей работе. Расхождение опытных данных [4] и расчетов настоящей работы обусловлено, вероятно, приближенным описанием кинетики химических реакций. В связи с этим, результаты настоящей работы носят в основном качественный характер, передавая характер зависимости $\delta_{кр}$ от степени разбавления гремучей смеси азотом. Для количественного описания распространения детонационных волн в газовых объемах конечной толщины необходимо более детальное описание химической кинетики. Здесь возможны, например, полный учет элементарных стадий, как это сделано в работе [8], а также полуэмпирическая аппроксимация реакции в высокотемпературной области [9].

Поступила в редакцию 30/IV 1982

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Н. Дремин, С. В. Савров и др. Детонационные волны в конденсированных средах. М.: Наука, 1970.
2. К. Tanaka, Т. Hikiita. Acta Astronaut., 1976, 3, 1005.
3. E. K. Dehora, I. A. Nicholls, R. B. Morrisov. 10-th Symp. (Intern.) on Combustion, 1965.
4. А. А. Васильев. ФГВ, 1982, 18, 3, 98.
5. М. Ф. Иванов, В. Е. Фортвов, А. А. Борисов. ФГВ, 1981, 17, 3, 108.
6. В. И. Димитров. Простая кинетика. Новосибирск: Наука, 1982.
7. В. В. Жаровцев. ЖВМ и МФ, 1977, 17, 5, 1320.
8. R. Atkinson, D. C. Bull, P. J. Shuff. Comb. Flame, 1980, 39, 3, 287.
9. Ю. А. Николаев. ФГВ, 1978, 14, 2, 73.

АНАЛИТИЧЕСКИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛОВ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И УДАРНЫХ АДИАБАТ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

В. Ф. Анисичкин
(Новосибирск)

Аналитические представления потенциалов межмолекулярного взаимодействия и связанных с ними кривых «холодного» сжатия и ударных адиабат конденсированных сред во многих отношениях более удобны, чем графические или табличные.

Описания достаточно сложных квантовомеханических расчетов межмолекулярных взаимодействий содержатся, например, в работе [1] для малых плотностей, в [2] — для очень больших (см. также ссылки