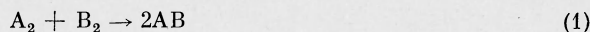


О ВЛИЯНИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ НА РАСПАД ПРОИЗВОЛЬНОГО РАЗРЫВА

В. Т. Биреев (Москва)

Эксперименты [1,2] показывают, что в ударной трубе, в которой толкаемым газом служит реагирующая с выделением тепла газовая смесь, после разрыва диафрагмы вблизи контактной поверхности образуется скачок уплотнения, распространяющийся по реагирующей смеси, сжатой в ударной волне.

Рассматривается начало процесса распада произвольного разрыва, когда толкаемым газом является химически реагирующая смесь, а толкающим — инертный газ. Как и в задаче о влиянии колебательной релаксации на распад произвольного разрыва [3], применяется метод разложения в ряды. Анализ проводится на примере протекающей во времени реакции



без учета колебательной релаксации.

Если эта реакция идет с выделением тепла, то в обе стороны от контактной поверхности распространяются волны сжатия, ударная волна, образовавшаяся при разрыве диафрагмы, ускоряется, а контактная поверхность замедляется, в дальнейшем слияние волн сжатия приводит к появлению скачка уплотнения.

Если реакция идет с поглощением тепла, то в обе стороны от контактной поверхности распространяются волны разрежения, последняя ускоряется, а ударная волна тормозится. Проведенный анализ распространяется на случай отражения ударной волны от торца ударной трубы в реагирующей смеси.

Пусть в начальный момент времени на диафрагме имеется разрыв постоянных параметров

$$\begin{aligned} \theta_1 = \theta_+, \quad P_1 = P_+, \quad V_1 = 0, \quad \mu_1 = \mu_+, \quad \gamma_1 = \gamma_+, \quad x \geq 0 \quad \left(\gamma = \frac{c_p}{c_v} \right) \\ \theta_2 = \theta_-, \quad P_2 = P_-, \quad V_2 = 0, \quad \mu_2 = \mu_-, \quad \gamma_2 = \gamma_-, \quad x \leq 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Камера низкого давления ($x \geq 0$) заполнена стехиометрической смесью газов A_2, B_2 . Образование компоненты AB , начинающееся после прохождения по этой смеси ударной волны, будем учитывать по закону Аррениуса [4]

$$\frac{dn(AB)}{dt} = A n(A_2) n(B_2) \exp\left(-\frac{E}{R\theta}\right) \quad (3)$$

Возбуждение колебательных степеней свободы двухатомных газовых молекул A_2, B_2, AB учитывать не будем. Тогда для удельных энтальпий имеем

$$h(A_2) = \frac{7}{2} \frac{R\theta}{\mu(A_2)}, \quad h(B_2) = \frac{7}{2} \frac{R\theta}{\mu(B_2)}, \quad h(AB) = \frac{7}{2} \frac{R\theta}{\mu(AB)} - Q_0 \quad (4)$$

В (2) — (4) приняты следующие обозначения: θ — температура, P — давление, V — скорость, μ — молекулярный вес, c_p и c_v — удельные теплоемкости, x — расстояние от диафрагмы, t — время, n — число молекул в единице объема, A — постоянная величина, E — энергия активации, R — газовая постоянная, Q_0 — тепловой эффект реакции ($Q_0 > 0$ для $Cl_2 + H_2 \rightarrow 2HCl$ и $Q_0 < 0$, например, для $N_2 + O_2 \rightarrow 2NO$).

Отметим, что молекулярный вес смеси независимо от количества вновь образовавшейся компоненты AB будет постоянным

$$\mu_1 = \frac{1}{2} [\mu(A_2) + \mu(B_2)] \quad (5)$$

Без учета вязкости и теплопроводности одномерное нестационарное течение, обусловленное разрывом начальных параметров (2), описывается по обе стороны от контактной поверхности уравнениями

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i V_i}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial V_i}{\partial t} + V_i \frac{\partial V_i}{\partial x} = -\frac{1}{\rho_i} \frac{\partial P_i}{\partial x}, \quad \frac{\partial h_i}{\partial t} + V_i \frac{\partial h_i}{\partial x} = \frac{1}{\rho_i} \left(\frac{\partial P_i}{\partial t} + V_i \frac{\partial P_i}{\partial x} \right) \quad (7)$$

Здесь с учетом (4), (5)

$$\rho_1 = \frac{P_1 \mu_1}{R\theta_1}, \quad h_1 = \sum C(k) h(k) = \frac{7}{2} \frac{R\theta_1}{\mu_1} - Q_0 C, \quad \rho_2 = \frac{P_2 \mu_2}{R\theta_2}, \quad h_2 = \frac{\gamma_2}{\gamma_2 - 1} \frac{R\theta_2}{\mu_2}$$

(ρ — плотность, C — массовая доля AB).

Для толкаемого газа в дополнение к (6) из (3) имеем (N — число Авогадро).

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 C) + V_1 \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 C) = \frac{AN}{4\mu_1} \rho_1^2 (1 - C)^2 \exp\left(-\frac{E}{R\theta_1}\right) \quad (8)$$

Перейдем к независимым переменным t и ψ и введем безразмерные параметры

$$\tau = \frac{t}{t_0}, \quad \zeta = \frac{(R_0 \theta_0)^{1/2}}{P_0 t_0} \psi, \quad p = \frac{P}{P_0}, \quad T = \frac{\theta}{\theta_0}, \quad u = \frac{V}{(R_0 \theta_0)^{1/2}}, \quad Q = \frac{Q_0}{R_0 \theta_0} \quad (9)$$

$$\psi = \int_{x_*(t)}^x \rho_1 dx \quad \left(R_0 = \frac{R}{\mu_1}, \quad t_0 = \frac{4R\theta_0}{ANP_0} \exp \frac{E}{R\theta_0} \right)$$

Здесь $x_*(t)$ — координата контактной поверхности, P_0 и θ_0 — некоторые постоянные значения, которые определим ниже.

Тогда (6) и (8) с учетом (7), (9) для реагирующей смеси примут вид

$$\frac{T}{p} \frac{\partial p}{\partial \tau} - \frac{\partial T}{\partial \tau} + p \frac{\partial u}{\partial \zeta} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial \tau} = - \frac{\partial p}{\partial \zeta} \quad (10)$$

$$\frac{7}{2} \frac{\partial T}{\partial \tau} - \frac{T}{p} \frac{\partial p}{\partial \tau} = Q \frac{\partial C}{\partial \tau}, \quad \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{p}{T} C \right) = \left[\frac{p}{T} (i - C) \right]^2 \exp \frac{E}{R\theta_0} \left(i - \frac{1}{T} \right)$$

Линеаризуя около этих постоянных значений и представляя решение в виде

$$T = 1 + \sum \tau^n T_n(z), \quad p = 1 + \sum \tau^n p_n(z) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (11)$$

$$u = u^0 + \sum \tau^n u_n(z), \quad C = \sum \tau^n C_n(z), \quad z = \zeta / \tau$$

получим из (10) n систем обыкновенных дифференциальных уравнений для определения T_n, p_n, u_n, C_n

$$n u_n - z u_n' + p_n' = 0, \quad {}^{5/7} (n p_n - z p_n') + u_n' = {}^{2/7} Q f_n$$

$$T_n' - (n/z) T_n = {}^{2/7} (p_n' - n/z p_n - Q f_n/z), \quad C_n' - (n/z) C_n = -f_n/z \quad (12)$$

$$(f_0 = 0, \quad f_1 = 1, \quad f_n = (E/R\theta_0 - 2) T_{n-1} - 2p_{n-1} - 2C_{n-1} \text{ для } n \geq 2)$$

Из (12) для $n = 0$ получаем

$$p_0 = \text{const}, \quad u_0 = \text{const}, \quad C_0 = \text{const} = 0, \quad T_0 = \text{const} \quad (13)$$

Из (12) и (13) видно, что при $n = 0$ параметры потока в реагирующей смеси являются «замороженными». Полагая в (13) $T_0 = p_0 = u_0 = C_0 = 0$, выберем в качестве постоянных в (9) $\theta_0, P_0, V_0 = u^0 (R_0 \theta_0)^{1/2}$ соответствующие параметры за ударной волной, движущейся с постоянной скоростью V_0^0 , которые имеют место при распаде произвольного разрыва [5], рассчитанного для начальных условий (2) без учета химической реакции. При этом температуру в толкающем газе на контактной поверхности обозначим θ_* .

Тогда граничными условиями для (12) будут на контактной поверхности

$$u_n = -G p_n \quad \text{при } z = 0 \quad (14)$$

и на ударной волне

$$u_n = D p_n, \quad T_n = F p_n, \quad C_n = 0 \quad \text{при } z = U \quad (15)$$

где

$$\bar{U} = \frac{V_0^0 - V_0}{(R_0 \theta_0)^{1/2}}, \quad \bar{C} = \left(\frac{\theta_* \mu_1}{\gamma_2 \theta_0^{1/2} z} \right)^{1/2}, \quad M_0 = \frac{V_0^0 - V_1}{(\gamma_1 R_0 \theta_1)^{1/2}}$$

$$\bar{D} = \frac{1 + M_0^2}{2M_0^3} \left(\frac{\theta_1}{\gamma_1 \theta_0} \right)^{1/2} \frac{P_0}{P_1}, \quad \bar{F} = \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} \left(1 + \frac{1}{\gamma_1 M_0^4} \right) \frac{\theta_1 P_0}{\theta_0 P_1}$$

Исключая из первых двух уравнений (12) соответственно p_n и u_n , получим

$$(1 - {}^{5/7} z^2) u_n'' + {}^{5/7} 2(n-1) z u_n' - {}^{5/7} n(n-1) u_n = {}^{2/7} Q f_n'$$

$$(1 - {}^{5/7} z^2) p_n'' + {}^{5/7} 2(n-1) z p_n' - {}^{5/7} n(n-1) p_n = {}^{2/7} Q [z f_n' - (n-1) f_n] \quad (16)$$

Приведем решение для $n = 1$. Из (16) следует

$$u_1 = a_1 (1 - \sqrt{{}^{5/7} z}) + b_1 (1 + \sqrt{{}^{5/7} z}), \quad p_1 = A_1 (1 - \sqrt{{}^{5/7} z}) + B_1 (1 + \sqrt{{}^{5/7} z}) \quad (17)$$

Произвольные постоянные a_1 , b_1 , A_1 и B_1 в (17) определим, используя (14), первое условие — из (15) и два первых уравнения — из (12)

$$A_1 = \frac{U}{7} \frac{(V^{5/7} - G) Q}{V^{5/7} (5/7 U + D + G + GDU)}, \quad B_1 = \frac{V^{5/7} + G}{V^{5/7} - G} A_1 \quad (18)$$

$$a_1 = V^{5/7} A_1 - 1/7 V^{7/5} Q, \quad b_1 = -V^{5/7} B_1 + 1/7 V^{7/5} Q$$

Подставляя (18) в (17), приходим к

$$P_1 = L_1 Q (1 + Gz), \quad u_1 = L_1 Q [-G + (2/7 L_1^{-1} - 5/7) z] \quad (19)$$

$$L_1 = 2/7 U (5/7 U + D + G + GDU)^{-1}$$

Теперь из третьего и четвертого уравнения (12) соответственно получаем

$$T_1 = 2/7 Q (1 + L_1 + d_1 z), \quad C = 1 + d_1^{\circ} z \quad (20)$$

Постоянные d_1 и d_1° определяются из второго и третьего условия (15), а именно

$$d_1 = 7/2 U^{-1} (5/7 L_1 + GUL_1 - 2/7), \quad d_1^{\circ} = -U^{-1} \quad (21)$$

Аналогичным образом легко найти решение для $n = 2, 3, \dots$

Так как U, G, D, F — положительные величины, то из (19) — (21) легко видеть, что при $Q > 0$ скорость ударной волны увеличивается

$$V^{\circ} = V_0^{\circ} + \tau p_1 S, \quad S = \sqrt{\gamma_1 R_0 \theta_1} \frac{\gamma_1 + 1}{4\gamma_1} \frac{P_0}{P_1 M_0} \quad (22)$$

Обратная картина имеет место при $Q < 0$. Далее рассмотрим характеристики системы уравнений (10), выходящие от контактной поверхности

$$\frac{d\zeta}{d\tau} = V^{7/5} \frac{p}{\sqrt{T}} \approx V^{7/5} \left(1 + \tau p_1 - \frac{1}{2} \tau T_1\right) \quad (23)$$

Интегрируя (23), с учетом (19) — (21) получим

$$\zeta = V^{7/5} (1 + \alpha_1 Q \tau) \left[(\tau - \tau_0) + Q \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} (\tau^2 - \tau_0^2) \right] \quad (24)$$

$$(\alpha_1 = V^{7/5} (L_1 G - 1/7 d_1), \quad \alpha_2 = 1/7 V^{7/5} (1 - 6L_1), \quad \alpha_1 > 0, \quad \alpha_2 > 0)$$

уравнение характеристики, выходящей из точки $\zeta = 0$, $\tau = \tau_0$.

Найдем точку пересечения этой характеристики с характеристикой, выходящей из $\zeta = 0$, $\tau = \tau_0 + \Delta\tau_0$, а затем устремим $\Delta\tau_0$ к нулю. Тогда получим, что при $Q > 0$ характеристики (23) пересекаются, начиная с

$$\tau_* \approx [Q (\alpha_1 + \alpha_2)]^{-1}$$

Таким образом, при $Q > 0$ от контактной поверхности идут волны сжатия, а при $Q < 0$ — волны разрежения. Приведенные соотношения можно использовать также для анализа течения в реагирующей газовой смеси за отраженной ударной волной, если реакция в смеси начинается после прохождения по ней последней.

Для этого нужно в качестве постоянных P_0 , θ_0 , V_0 выбрать соответствующие значения параметров за отраженной ударной волной, рассчитанные без учета химической реакции, а также положить в (14) и ниже $G = 0$, взяв в (15) в качестве V_0° скорость отраженной волны, а V_1 — скорость газа за падающей ударной волной.

Изложенное выше показывает возможность получения второго скачка уплотнения, возникающего при поджиге газовых смесей ударными волнами и расчета дальнейшего течения в рамках одномерного нестационарного движения газа с учетом неравновесности физико-химических процессов.

Поступила 2.VII 1965

ЛИТЕРАТУРА

1. Саламандра Г. Д., Баженова Т. В., Зайцев С. Г., Солоухин Р. И., Набоко И. М., Севастьянова И. К. Некоторые методы исследования быстро протекающих процессов и их применение к изучению формирования детонационной волны. Изд-во АН СССР, 1960.
2. Gaudon A. G., Hurler I. R. Temperature measurements behind shock-initiated detonation in CO/O₂ mixtures. Les ondes de detonation. Gif-Sur-Yvette 28 août-2 septembre, 1961.
3. Архипов В. Н. Влияние релаксации на распад произвольного разрыва, ПМТФ, 1964, № 4.
4. Кондратьев В. Н. Кинетика химических газовых реакций. Изд-во АН СССР, 1958.
5. Курант Р., Фридрихс К. Сверхзвуковые течения и ударные волны. Изд. иностр. лит., 1950.