

УДК 533.6.011

## УСИЛЕНИЕ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ ЗОНОЙ ВТОРИЧНЫХ РЕАКЦИЙ В ДВУХФАЗНОЙ СРЕДЕ

Э. А. АНТОНОВ, А. М. ГЛАДИЛИН

(Ленинград)

Предлагается метод численного расчета одномерных нестационарных течений смесей газа с частицами, основанный на разделении системы дифференциальных уравнений для двухфазной среды на две подсистемы. На его основе решена задача о распространении плоской детонационной волны в смеси детонирующего газа с частицами, за фронтом которой происходят вторичные химические реакции между парами материала частиц и продуктами детонации. Определены профили скорости газа и термодинамических функций за фронтом детонационной волны, а также зависимость скорости детонации от расстояния до места ее инициирования. Получены условия усиления детонационной волны зоной вторичных реакций.

**1. Постановка задачи.** Пусть полупространство  $x > 0$ , ограниченное слева стенкой, заполнено смесью газов, способной к детонации, в которой равномерно распределены твердые частицы радиуса  $r$ . Смесью газов будем именовать первой фазой, а частицы — второй. Предполагается, что за фронтом детонационной волны, распространяющейся по такой системе, частицы будут испаряться и их пары будут вступать в экзотермическую реакцию с продуктами детонации с выделением тепла  $Q$ .

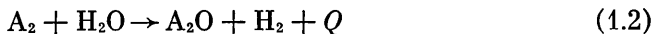
При некоторых условиях энергия этой реакции может передаваться во фронт первичной детонации и усиливать ее. Цель данной работы выяснить, при каких условиях в рамках используемой модели возможно усиление детонационной волны вторичными реакциями, а также получить картину течения за фронтом.

Для численного эксперимента в качестве реакции, осуществляющей первичную детонацию, была выбрана реакция водорода с кислородом



Детонация запускалась от стенки и распространялась вправо с постоянной скоростью  $D_0$  до тех пор, пока ее фронт не догоняли возмущения, идущие из зоны вторичной химической реакции.

Предполагалось, что вторичная химическая реакция паров частиц, состоящих из элемента  $A$ , с продуктами детонации идет по следующему механизму:



Поскольку расчет каких-то конкретных систем не был целью данной работы, то элемент  $A$  выбирался произвольно и для простоты его атомный вес брался таким, чтобы средний молекулярный вес газа в процессе испарения и реакции оставался постоянным. Для реакции (1.1) и (1.2) этому удовлетворяет элемент с атомным весом, равным девяти. Начальное соотношение между массой частиц и продуктами детонации бралось стехиометрическим. Предполагалось также, что частицы не обдираются потоком, а массообмен осуществляется только за счет испарения, причем все

испаряющееся вещество мгновенно вступает в реакцию с водой с выделением тепла  $Q$ .

Для коэффициентов сопротивления частиц  $C_D$  и теплоотдачи  $h_D$  были взяты общепринятые значения [1]. Теплопроводность материала частиц полагалась равной нулю, в результате чего все тепло, передаваемое от газа к частицам, расходовалось на испарение их массы. Энергия, необходимая для нагрева частиц до температуры кипения, включалась в скрытый коэффициент испарения  $L$ . Учитывалась также зависимость теплового эффекта вторичной реакции от температуры, при которой она осуществлялась.

**2. Дифференциальные уравнения.** Для численного решения задачи использовалась система дифференциальных уравнений, описывающая поведение двухфазных сред, при наличии фазовых переходов и химических реакций [2], записанная для случая одной пространственной переменной. В двухфазной среде, состоящей из смеси газа с твердыми или жидкими частицами, различие в значениях объемной концентрации и истинной плотности фаз обычно достигает трех-четырёх порядков. Это позволяет с небольшой ошибкой заменить среднюю плотность первой фазы ее истинным значением и пренебречь в уравнении движения второй фазы членами, содержащими в качестве множителей отношение истинных плотностей фаз  $\rho_1 / \rho_2 \approx 10^{-3} \div 10^{-4}$ .

В результате этих преобразований исходная система дифференциальных уравнений распадается на две подсистемы, описывающие соответственно поведение первой и второй фаз, связь между которыми осуществляется только через правые части.

Если считать первую фазу идеальным газом, то описывающая ее подсистема будет иметь следующий вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{\rho c} \frac{\partial p}{\partial t} + (u + \bar{c}) \left[ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho c} \frac{\partial p}{\partial x} \right] = -B_0 B + \frac{K_0 K}{\rho} \left[ (v - u) + \frac{p}{\rho c} + \frac{\gamma - 1}{c} \Delta E \right] \left( \frac{dx}{dt} = u + c \right) \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{1}{\rho c} \frac{\partial p}{\partial t} + (u - c) \left[ \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{\rho c} \frac{\partial p}{\partial x} \right] = -B_0 B - \frac{K_0 K}{\rho} \left[ (u - v) + \frac{p}{\rho c} + \frac{\gamma - 1}{c} \Delta E \right] \left( \frac{dx}{dt} = u - c \right) \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + u \frac{\partial S}{\partial x} = \frac{B_0 B}{\rho T} \left[ \Delta E - \frac{p}{\rho} \right] \left( \frac{dx}{dt} = u \right) \quad (2.3)$$

где

$$B = rn \text{Nu} (T - \theta), \quad K = r^2 n C_D |u - v| (u - v) \\ \Delta E = E - E + 1/2 (u - v)^2, \quad E = Q(T) - L + E^* \quad (2.4)$$

Подсистема (2.1) — (2.3) записана в характеристической форме, в безразмерном виде.

Через  $u$ ,  $p$ ,  $\rho$ ,  $c$ ,  $T$ ,  $E$ ,  $S$  обозначены соответственно скорость, давление, плотность, скорость звука, температура, внутренняя энергия и энтропия первой фазы,  $\gamma$  — отношение теплоемкостей,  $B_0$  и  $K_0$  — константы,  $r$  — радиус частиц второй фазы,  $n$  — число частиц в единице объема,  $\text{Nu}$  — число Нуссельда,  $\theta$  — температура второй фазы,  $E^*$  — внутренняя энергия паров второй фазы в зоне фазового перехода,  $C_D$  — коэффициент сопротивления частиц,  $L$  — скрытая теплота испарения,  $Q(T)$  — тепловой эффект вторичной реакции.

Так как по предположению частицы испаряются без прогрева, то их внутренняя энергия остается постоянной и подсистема, описывающая вторую фазу, записывается в следующем безразмерном виде:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + v \frac{\partial n}{\partial x} = -n \frac{\partial v}{\partial x} \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} = e_0 e \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} + v \frac{\partial r}{\partial x} = -d_0 d \quad (2.7)$$

$$e = \frac{\rho C_D |u - v| (u - v)}{r}, \quad d = \frac{\text{Nu}(T - \theta)}{r} \quad (2.8)$$

Здесь  $e_0$  и  $d_0$  — безразмерные константы.

Таким образом, вместо того, чтобы решать одну большую систему дифференциальных уравнений, теперь достаточно совместно решить две ее подсистемы. При этом методы решения подсистемы, описывающие первую фазу, достаточно хорошо разработаны. Целесообразность такого разделения оправдывается еще и тем, что решения этих подсистем могут обладать разной гладкостью, в результате чего для одной из них может быть использован более простой вычислительный алгоритм. Так, например, решение подсистемы (2.5) — (2.7) остается непрерывным при переходе через любые разрывы, образующиеся при движении первой фазы.

Исследование особенностей поведения решения подсистемы (2.5) — (2.7) удобно проводить в области, в которой известно значение производной скорости второй фазы  $dv/dx$ . В этой области подсистема (2.5) — (2.7) становится гиперболической и записывается в инвариантном виде, причем дифференцирование всех уравнений происходит вдоль одной трехкратно вырожденной характеристики  $dx/dt = v$ . При этом оказывается, что вдоль характеристик, на которых терпит разрыв производная скорости второй фазы  $dv/dx$ , терпит разрыв и решение  $n(x, t)$  уравнения (2.5).

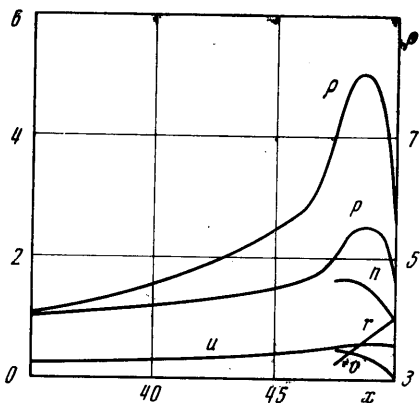
Для численного интегрирования подсистемы (2.5) — (2.7) лучше всего применять разностные схемы, использующие фиксированные интервалы по времени. В этом случае в окрестности каждого узла сетки на прямой  $t = \text{const}$  определяется производная  $dv/dx$  и интегрирование подсистемы может быть осуществлено методом характеристик. При этом верхняя грань допустимого шага по времени  $\tau_2$  находится из условия пересечения характеристик, выходящих из соседних узлов

$$\tau_2 < \| \alpha \|^{-1} \quad (2.9)$$

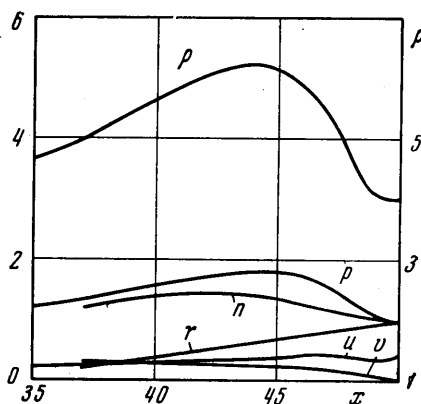
где  $\| \alpha \|$  — норма вектора  $\alpha$ , компонентами которого являются отрицательные производные скорости второй фазы  $dv/dx$  в узлах сетки на прямой  $t = \text{const}$ .

Для совместного решения подсистем (2.1) — (2.3) и (2.5) — (2.7) был выбран метод, использующий подвижные сетки [3].левой границей счетной области служила неподвижная стенка, от которой вправо распространялась детонация, а правой границей был сам детонационный фронт. Для определения скорости движения правой границы использовался распад произвольного разрыва в детонирующем газе.

Решение подсистемы (2.1) — (2.3) на каждом счетном шаге в точности следовало схеме, описанной в [3]. Для интегрирования подсистемы (2.5) — (2.7) использовалась та же сетка и интегрирование велось вдоль характеристик  $dx/dt = v$  с использованием итераций.



Фиг. 1



Фиг. 2

Для проверки работы программы радиус частиц второй фазы приравнялся нулю, и полученное решение сравнивалось с аналитическим, описывающим распространение плоской детонационной волны от неподвижной стенки.

**3. Результаты численного эксперимента.** Детонационная волна, продуцированная реакцией (1.1) и используемая в расчетах, характеризовалась следующими значениями параметров на фронте:  $D_0 = 2500$  м/сек,  $P_D = 13$  ат,  $T_D = 3300^\circ$  К,  $u_D = 1070$  м/сек.

После приведения к безразмерному виду начальные значения всех величин (фиг. 1—4) на фронте невозмущенной волны имели следующие значения:  $D = 1$ ,  $u = 0.43$ ,  $p = 1$ ,  $\rho = 4.05$ ,  $r = 1$ ,  $n = 1$ ,  $v = 0$ .

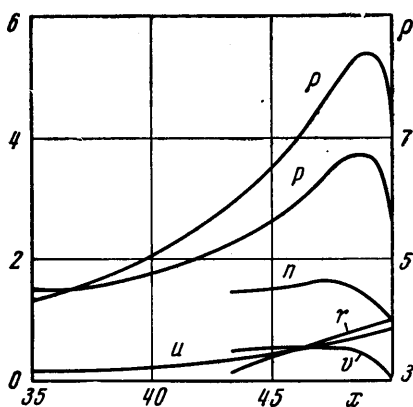
На фиг. 1—3 приведена карта течения за фронтом детонационной волны, находящимся на расстоянии 50 см от места инициирования. На всех графиках по оси абсцисс отложено расстояние в см, а по оси ординат — безразмерные решения подсистем (2.1) — (2.3) и (2.5) — (2.7), причем шкала для плотности находится справа, а для всех остальных величин — слева.

На фиг. 1 приведено решение для частиц радиуса  $2.5 \cdot 10^{-6}$  м и теплового эффекта вторичной реакции  $Q = 150$  ккал/моль. Здесь вместо волны разрежения сразу же за фронтом образуется зона повышенного давления и плотности первой фазы, имеющая вид горба, значения параметров в максимуме которого в несколько раз превышают свои значения на фронте. Частицы такого радиуса полностью испаряются на расстоянии 2.5 см от фронта. Скорость детонационного фронта увеличивается незначительно — всего на 85 м/сек.

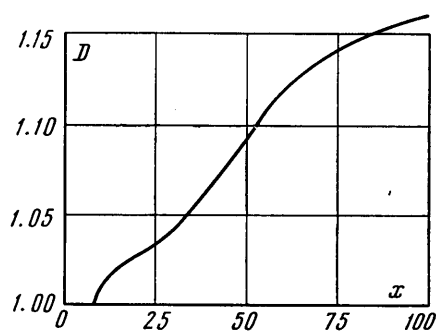
На фиг. 2 приведено решение при том  $Q = 150$  ккал/моль, что и на фиг. 1, но радиус частиц равен  $5 \cdot 10^{-6}$  м. При этом «горбы» становятся шире и ниже, и возмущения от них уже не догоняют детонационный фронт.

На фиг. 3 приведено решение для частиц радиуса  $5 \cdot 10^{-6}$  м и теплового эффекта  $Q = 250$  ккал/моль. Здесь горбы давления и плотности резко приближаются к детонационному фронту и, оставаясь шире, чем на фиг. 1, становятся выше их. Скорость детонации при этом увеличивается на 575 м/сек.

На фиг. 4 приведена зависимость скорости детонационного фронта от расстояния до места инициирования детонации для частиц радиусом  $5 \cdot 10^{-6}$  м и теплового эффекта вторичной реакции  $Q = 200$  ккал/моль. Из фиг. 4 видно, что догон детонационного фронта возмущениями, идущими из зоны вторичной реакции, происходит уже на расстоянии 8 см от



Фиг. 3



Фиг. 4

места инициирования детонации. Поведение скорости детонации можно объяснить, по-видимому, тем, что на разных участках разгона усиление головного фронта осуществляется разными механизмами: за счет повышения температуры непосредственно за фронтом, что увеличивает скорость звука в газе, и благодаря увеличению скорости газа за фронтом вследствие отрицательного градиента давления в области между горбом и фронтом детонационной волны. Это увеличение скорости газа отчетливо видно на фиг. 2. Чтобы проследить дальнейшее поведение скорости детонационного фронта, была составлена программа, позволяющая вести расчет с тем же шагом на расстоянии 200 см. При этом оказалось, что кривая скорости детонационной волны на расстоянии свыше 100 см от места инициирования детонации выходит на «плато».

Повышение давления за фронтом детонационной волны, наблюдаемое на фиг. 1—3, обусловлено в основном увеличением плотности газа за счет интенсивного испарения частиц. Это приводит к тому, что величина отношения  $p/\rho$ , определяющая скорость звука в газе, увеличивается незначительно. Сравнение величин  $u + c$  в максимуме горба давления и на фронте детонационной волны показывает, что они примерно равны. Поэтому, несмотря на большую крутизну профиля давления, ударная волна не образуется и конфигурации профилей термодинамических функций за фронтом детонационной волны устойчивы.

Авторами было просчитано значительное число вариантов, в которых радиус частиц и тепловой эффект вторичной реакции изменились соответственно от  $2,5 \cdot 10^{-6}$  до  $5 \cdot 10^{-5}$  м и от 100 до 300 ккал/моль. При этом получено, что частицы радиусом более  $10^{-5}$  м даже при  $Q = 300$  ккал/моль не способны увеличивать скорость детонационной волны при условии, что массообмен осуществляется только за счет испарения. Эти же ограничения на радиус частиц приводятся в [1] для существования самоподдерживающейся детонации в двухфазных средах.

Поступило 22 X 1971

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Борисов А. А., Гельфанд Б. Е., Губин С. А., Когарко С. М., Подгребенков А. Л. Зона реакции при детонации двухфазных смесей. Физика горения и взрыва, 1970, т. 6, № 3
2. Нигматулин Р. И. Методы механики сплошной среды для описания многофазных смесей. ПММ, 1970, т. 34, вып. 6.
3. Алалыкин Г. Б., Годунов С. К., Киреев И. Л., Плинер Л. А. Решение одномерных задач газовой динамики в подвижных сетках. М., «Наука», 1970.