

ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ

УДК 533.6.011.72:541.126.2

ЗАВИСИМОСТЬ ПОРОГА ДЕТОНАЦИИ СМЕСИ Н₂–ВОЗДУХ ОТ МАЛЫХ ДОБАВОК Хе

© 2021 г. Г. А. Атанов^{1,2}, В. М. Ежов^{2,3}, С. В. Куликов^{2*}, О. А. Папанов^{1,2}, Н. А. Червонная²

¹Московский государственный университет им. Ломоносова, Москва, Россия

²Институт проблем химической физики Российской академии наук, Черноголовка, Россия

³Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова, Москва, Россия

*E-mail: kuls@icp.ac.ru

Поступила в редакцию 24.07.2020;

после доработки 17.10.2020;

принята в печать 20.10.2020

Изучалось влияние малой добавки Хе на условия возникновения детонации в падающей ударной волне при изменении ее интенсивности. Были проведены эксперименты в ударной трубе со смесью $(75 - q)\% \text{H}_2 + 25\% \text{воздуха} + q\% \text{Хе}$, где $q = 0, 0.25, 0.5$. Добавление Хе приводило к смещению порога детонации в область условий, более неблагоприятных для ее возникновения. Более того, уменьшение q с 0.5 до 0.25 вызывало более сильный сдвиг порога детонации, т.е. зависимость от q становилась немонотонной. Данный эффект обусловлен сильным повышением частоты высокоэнергетических столкновений молекул O_2 и Хе во фронте по сравнению с равновесием за волной и последующим значительным ускорением химического взаимодействия O_2 и H_2 за фронтом. Он является следствием возникновения специфической поступательной неравновесности во фронте волны. На это указывают результаты ранее проведенных аналогичных исследований влияния замещения малого количества Не соответствующим количеством Хе на условия возникновения детонации для смесей $10\% \text{H}_2 + 5\% \text{O}_2 + 85\% \text{Не}$. Кроме того, результаты выполненного численного моделирования со смесями $(75 - q)\% \text{H}_2 + 25\% \text{воздуха} + q\% \text{Хе}$ ($q = 0.25, 0.5$) с учетом вращательной релаксации O_2 и N_2 для условий, близких к условиям вышеупомянутых экспериментов, показали возможность немонотонного смещения порога детонации.

Ключевые слова: ударная труба, ударная волна, детонационная волна, поступательная неравновесность, нестационарное статистическое моделирование, распределение пар частиц по относительным скоростям, вращательная неравновесность.

DOI: 10.31857/S0207401X21030031

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы ведутся исследования газовых цепных процессов, а также влияния поступательной неравновесности во фронте на эти процессы за ударной волной (УВ); см., например, [1–13]. Под фронтом УВ понимается переходная область между газами, находящимися в равновесии по поступательным степеням свободы перед и за УВ, в которой распределение молекул по скоростям не является максвелловским. Научный интерес к данной проблеме обусловлен возможной перспективностью использования эффектов поступательной неравновесности для практических приложений, прежде всего для управления воспламенением и детонацией за УВ в горючих смесях. Изучение неравновесных явлений во фронте УВ имеет давнюю историю. Уже в первых исследованиях в ударных трубах (УТ) [13] экспериментаторами регистрировались максимумы излучения и концентрации электронов во фронте УВ даже весьма слабой интенсивности с

числами Маха $M = 3-4$. Было отмечено, что наиболее сильно это проявляется в УВ для случая легких газов, содержащих малые примеси тяжелых молекул. Рядом различных исследователей высказывалась идея, что именно в газе, содержащем малую тяжелую добавку, может возникнуть сильная поступательная неравновесность во фронте УВ, которая, возможно, и приводит к подобным эффектам. Об этом свидетельствуют результаты, представленные в работах [4–6].

В работе [14] были сформулированы физические предпосылки возникновения сильного эффекта поступательной неравновесности во фронте УВ для смесей, состоящих из основного легкого газа и двух тяжелых примесей, заметно различающихся по молекулярной массе. Позднее эта идея была подтверждена путем численного моделирования [9–11, 15] и экспериментально [9, 11].

Проведены исследования влияния малой добавки Хе на условия возникновения детонации в

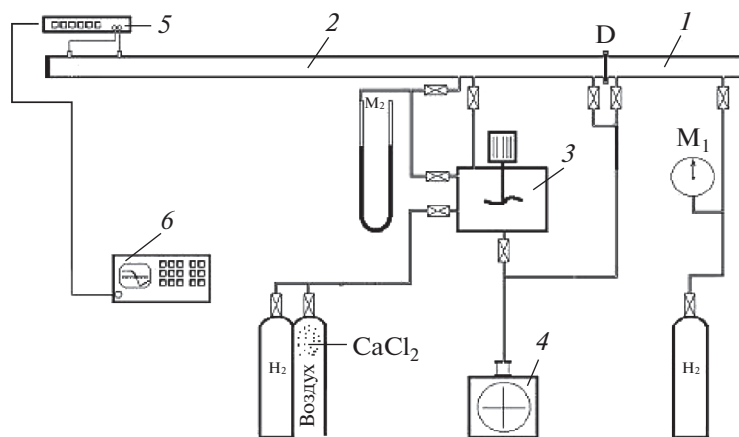


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: 1 – КВД; 2 – КНД; 3 – смеситель; 4 – вакуумный насос; 5 – пьезоэлектрические датчики; 6 – осциллограф; M_1 , M_2 – манометры; D – разделительная диафрагма.

смесях H_2 и воздуха, начатые ранее для смесей $He-O_2-H_2-He$ [9–11]. Они направлены на более глубокое понимание влияния поступательной неравновесности во фронте волны на физико-химические процессы в смесях, в которых содержится значительно больше H_2 , чем O_2 , а также заметно много одной из тяжелых примесей (смесь O_2 и N_2). Наряду с экспериментами в УТ, в представляемой работе методом Монте-Карло нестационарного статистического моделирования (direct simulation Monte Carlo) изучалась численно поступательная неравновесность для смеси H_2 –воздух с малой добавкой He . При этом учитывалась вращательная релаксация O_2 и N_2 . В качестве меры неравновесности рассматривались максимальные (обнаруженные при численном моделировании в различных точках фронта) для данного значения M ударной волны величины отношений значений распределений (G_{23}) пар частиц O_2 и He по относительным скоростям (g) к соответствующим равновесным значениям за волной при одинаковых g . Молекулы O_2 и He являются тяжелыми добавками, сильно различающимися по массе. Значения MG для данных пар молекул показывают, когда во фронте ударной волны может возникнуть ситуация, при которой частота столкновений с большой энергией относительного движения между молекулами O_2 и He будет сильно превышать свою равновесную величину за волной. При таких столкновениях в зоне поступательной неравновесности может появиться значительное избыточное количество либо атомов O , появляющихся непосредственно при диссоциации O_2 , происходящей за один элементарный акт, либо сильно возбужденных молекул O_2 . А это значительно ускоряет химическое взаимодействие O_2 и H_2 за фронтом, идущее по разветвленному цепному механизму. Подобные исследования представ-

лены в работе [10] для смеси H_2-O_2-He с малой добавкой He . При этом внутренние степени свободы молекул не рассматривались.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Используемая ударная труба практически не отличается от применяемой в опытах, описанных в работах [9, 11]. Ее схема представлена на рис. 1, где дополнительно показаны баллоны используемых газов и схема напуска воздуха. При приготовлении исследуемой смеси использовались газы высокой чистоты ксенон и H_2 . Воздух брался из атмосферы и осушался, проходя через прокаленный $CaCl_2$.

Следует кратко напомнить характеристики трубы. Сама ударная труба изготовлена из нержавеющей стали, имеет внутренний диаметр 76 мм и состоит из камеры высокого давления (КВД) длиной 1.5 м и канала низкого давления (КНД) длиной 4.5 м, которые разделены металлической диафрагмой. Перед началом опытов КВД и КНД откачивались до остаточного давления не более 10^{-2} Торр. Камера высокого давления наполнялась газом-толкателем H_2 , а КНД – исследуемой газовой смесью, которая находилась при комнатной температуре. Данная смесь готовилась в смесителе. Приготовленная исследуемая смесь перемещалась в смесителе перед напуском в КНД с помощью механической мешалки. В используемых ниже опытах ошибка в значениях концентраций перед фронтом для He не превышала 10%, для H_2 – 0.5% и для воздуха – 1%. В момент разрыва диафрагмы давление в КВД составляло в приведенных ниже экспериментах не 9.6 атм, как в [9], а 13.2 атм, как отмечено в [11], в силу использования медной фольги другой толщины для изготовления диафрагм. Раскрытие диафрагмы происхо-

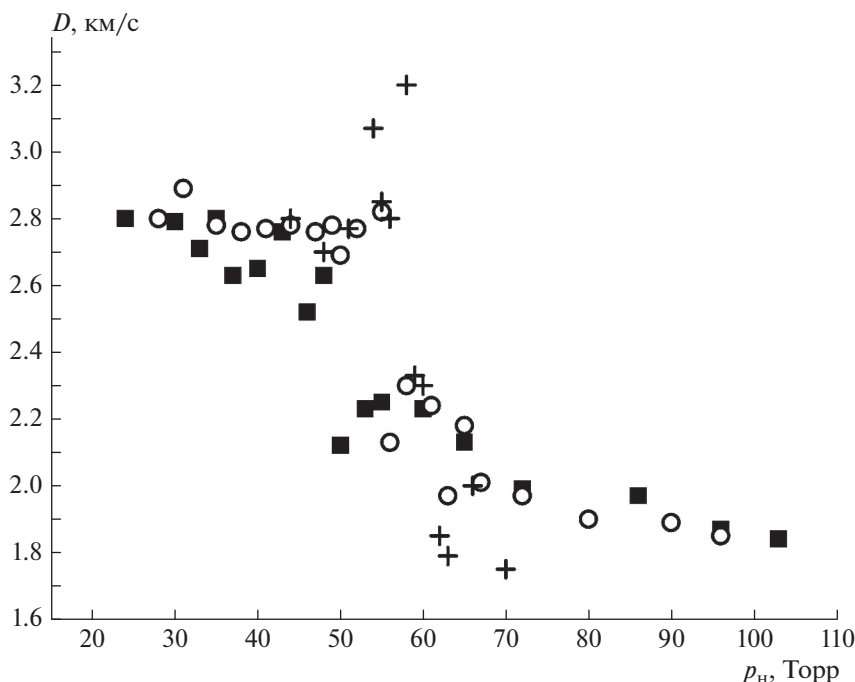


Рис. 2. Зависимости скорости волны D от давления p_n в КНД для разных смесей: ■ — смесь 75% H_2 + 25% воздуха; + — смесь 74.85% H_2 + 25% воздуха + 0.25% Xe; ○ — смесь 74.5% H_2 + 25% воздуха + 0.5% Xe.

дило на крестообразном ноже. Такой нож широко используется почти во всех ударных трубах. В каждом опыте давление в камере высокого давления в момент разрыва диафрагмы с точностью до 0.1 атм фиксировалось по манометру. Минимальный перепад давлений в момент разрыва диафрагмы равен приблизительно 80 атм. Очевидно, что давления, равные 0.16 и 0.025 атм, это фактически вакуум по сравнению с давлением в 13.2 атм. Этим и объясняется раскрытие диафрагмы с достаточной точностью при одном и том же давлении в камере высокого давления. Следует напомнить, что увеличение начального давления (p_n) в канале низкого давления уменьшает перепад давлений между КВД и КНД, а следовательно, и интенсивность начальной ударной волны.

В конце КНД располагалась измерительная секция длиной 1 м с пьезоэлектрическими датчиками давления, что позволяло измерять скорость волны, D . Дополнительно в ряде опытов измерялось излучение радикалов ОН в области 306 нм с помощью метода эмиссионной спектроскопии: использовались фотоумножитель ФЭУ-79 и фильтр УФС-5 с диапазоном пропускания 240–400 нм.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА

Были проведены эксперименты для смеси $(75 - q)\% \text{H}_2 + 25\% \text{воздуха} + q\% \text{Xe}$ в падающей ударной волне при различных интенсивностях

последней. Здесь $q = 0, 0.25, 0.5$ мольн.% Xe. Как известно, в воздухе содержится около 20% O_2 . Легко видеть, что концентрация O_2 в рассматриваемых смесях близка к 5%. Это было сделано специально, для того чтобы сравнить полученные результаты с представленными в работах [9, 11], где концентрация O_2 была равна 5%.

На рис. 2 показаны величины D (в км/с), полученные при различных значениях p_n . Каждая точка представляет результаты одного опыта. Для смеси без добавки Xe (■) при $p_n < 50$ Торр наблюдалась устойчивая детонационная волна (ДВ), движущаяся с достаточно высокой скоростью $D = 2.5 - 2.8$ км/с. При $p_n \geq 50$ Торр наблюдалась УВ, движущаяся с заметно меньшей скоростью $D = 1.85 - 2.25$ км/с. Необходимо подчеркнуть, что несмотря на заметный разброс скоростей в областях как детонационной, так и ударной волн, сами эти области четко разделены, так как имеется хорошо видимая “шель” между значениями скоростей ДВ и УВ и резкая граница между ними (см. рис. 2). В опытах не удалось зафиксировать переходную область, в которой наблюдалась неустойчивая детонация. Подобное заключение было сделано и в работах [9, 11] для смесей $\text{O}_2 - \text{H}_2 - \text{He}$ и $\text{O}_2 - \text{H}_2 - \text{He} - \text{Xe}$.

Для смеси 74.5% $\text{H}_2 + 25\% \text{воздуха} + 0.5\% \text{Xe}$ при $p_n < 55$ Торр также наблюдалась устойчивая ДВ, движущаяся со скоростью $D = 2.7 - 2.9$ км/с. При $p_n \geq 55$ Торр наблюдалась УВ, движущаяся со скоростью $D = 1.85 - 2.3$ км/с. Следует отметить

сдвиг порога детонации в сторону больших p_n при добавлении 0.5% Хе в смесь, т.е. в область более слабых начальных ударных волн, формирующихся непосредственно после разрыва диафрагмы между КВД и КНД.

Для смеси 74.25% H_2 + 25% воздуха + 0.25% Хе при $p_n < 59$ Торр тоже наблюдалась устойчивая ДВ, движущаяся со скоростью $D = 2.7-3.2$ км/с. В этом случае, как дополнительно свидетельствует наблюдаемое излучение радикала ОН, химическое взаимодействие O_2 и H_2 идет интенсивно. При $p_n \geq 59$ Торр наблюдалась УВ, движущаяся со скоростью $D = 1.7-2.3$ км/с, и не было обнаружено излучения ОН.

Если сравнивать со смесью без Хе, то следует отметить сдвиг порога детонации в сторону больших p_n и при добавлении 0.25% Хе в смесь, т.е. в область более слабых начальных ударных волн, формирующихся непосредственно после разрыва диафрагмы между КВД и КНД. Кроме того, сдвиг детонационного порога был гораздо больше, чем для смеси с добавкой 0.5% Хе. Это свидетельствует о немонотонном характере зависимости смещения порога детонации в сторону более мягких условий возникновения детонации (в сторону больших p_n). Ранее было показано [9–11], что такое поведение обусловлено только спецификой поступательной неравновесности во фронте волны и больше ничем. Данный факт не связан с более высокой столкновительной эффективностью Хе по сравнению с Не и не обусловлен изменением среднего молекулярного веса смеси [9–11]. Эти эффекты дают теоретически только монотонные зависимости. Кинетика разветвленных цепных реакций, описывающая взаимодействие O_2 и H_2 , не может объяснить немонотонный сдвиг порога детонации. Это видно из того, что единственно важной тримолекулярной реакцией, на скорость которой может повлиять добавка Хе, является реакция $H + O_2 + M = HO_2 + M$.

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Расчеты были проведены методом Монте-Карло нестационарного статистического моделирования. Основоположником данного метода является Бёрд [16]. Методика моделирования представлена в работах [17, 18]. Но для удобства читателя ниже будут кратко изложены ее основные пункты.

Процедура моделирования состоит в следующем: в первый момент времени модельные частицы, представляющие газовую смесь, имеют в соответствии с начальными условиями заданные скорости и распределены по ячейкам длиной Δx , на которые разбито исследуемое пространство координат. Полагается, что столкновения парные и с определенной вероятностью происходят только между частицами, находящимися в одной ячейке.

Процесс эволюции рассматриваемой системы за интервал времени Δt расщепляется на два этапа: 1) только перемещение частиц с неизменными скоростями в промежутке времени Δt ; 2) только изменение скоростей частиц в результате их столкновений в этом же промежутке времени при их фиксированных положениях. Отрезок прямой, представляющий область моделирования, разбивался на ячейки равной длины Δx . На границах области моделирования параметры потоков задавались равновесными перед и за УВ в соответствии с числом Маха и условиями разрыва на фронте УВ (см. формулы (2.5)–(2.7) в работе [19]).

В начальный момент времени фронт УВ задавался в виде поверхности разрыва для наиболее легких компонентов. Для самого тяжелого компонента поверхность разрыва заменялась переходной областью с монотонным, линейным изменением параметров.

При эволюции системы во времени частицы, пересекающие границы области моделирования, исключались из рассмотрения. А с целью компенсации этих потерь задавались потоки новых частиц внутрь области моделирования. Для всех компонентов, за исключением наиболее представительного, скорости вводимых частиц задавались случайным образом в соответствии с равновесными функциями распределения перед и за фронтом волны. Причина этого исключения в том, что граничные условия, соответствующие гипотезе о молекулярном хаосе и термодинамическому равновесию, не позволяют в численных экспериментах получить строго стационарную УВ. Последняя будет медленно смещаться к какой-либо границе. При таких естественных граничных условиях данное поведение волны является, по-видимому, специфической особенностью рассматриваемой задачи. Оно объясняется отклонением величин потоков вещества, импульса и энергии через границы от их теоретических значений на бесконечности, вероятно, в силу статистических флуктуаций из-за недостаточного большого числа модельных частиц и размера области моделирования. Для стабилизации положения фронта УВ использовалась процедура регулирования вводимого в модельную область числа частиц наиболее представительного компонента (H_2) [18]. Во всех рассматриваемых ниже вариантах моделирования она обеспечивала практически неподвижное положение волны в течение некоторого времени счета. Поэтому после некоторого числа этапов перемещений и столкновений возобновлялось предварительно заданное распределение частиц в модельном пространстве и по скоростям. В упомянутом ниже моделировании это число полагалось равным 40.

Данный метод моделирования позволяет получать эволюцию модельной системы в соответствии с уравнением Больцмана, избегая очень

трудоемкого решения последнего и предоставляя наиболее полную и достоверную информацию об этой системе. Кроме того, метод не имеет принципиальных ограничений по ширине спектра энергий столкновений, однако с ростом энергий рассматриваемых процессов резко возрастает вычислительная сложность задачи. Лишь относительно недавнее развитие вычислительной техники дало возможность существенно продвинуться при расчетах в область больших энергий.

Рассматривалось одномерное пространство координат и трехмерное пространство скоростей. Иными словами, отслеживалось только движение частиц вдоль потока. А при моделировании столкновений частиц рассматривались все три составляющие их скоростей.

Моделировалась смесь $(75 - q)\% \text{H}_2 + 25\% \text{воздуха} + q\% \text{Xe}$ ($q = 0.5, 0.25$). Считалось, что воздух состоял из $20\% \text{O}_2$ и $80\% \text{N}_2$. Полагалось, что $M = 3.53$. Это соответствует условиям, устанавливаемым непосредственно после срыва детонации в опытах.

Молекулы рассматривались как абсолютно упругие твердые сферы. Среднее число модельных частиц, N , в ячейке перед фронтом для каждого компонента равно 12000. При моделировании использовались весовые множители для частиц. Весовой множитель показывает число реальных молекул, представляемых данной модельной частицей. Для каждой частицы H_2 весовой множитель полагался равным единице. А для частиц других компонентов величина весового множителя была выбрана так, что каждый компонент был представлен одним и тем же числом модельных частиц. При этом для модельных частиц одного сорта весовые множители задавались равными друг другу. Полагались равновесными значения параметров потока на границах отрезка моделирования перед и за УВ. Был реализован мелкозернистый параллелизм [17] на четырех процессорах ЭВМ МВС100К Межведомственного суперкомпьютерного центра.

Отношение масс молекул H_2 , O_2 , Xe и N_2 , как широко принято, было $1 : 16 : 65 : 14$, а диаметров — $1 : 1.32 : 1.8 : 1.37$ (см. приложение А в [16]). Отношения диаметров получены из измерений взаимной диффузии рассматриваемых газов.

Колебательные степени свободы всех рассматриваемых двухатомных молекул не принимались во внимание в силу того, что их релаксация интенсивно происходит далеко за фронтом УВ, когда уже поступательные степени свободы находятся в равновесии. По этой же причине не рассматривалась вращательная релаксация H_2 . Как известно, для H_2 время вращательной релаксации (τ_r) приблизительно в 20 раз больше, чем для O_2 и N_2 [20]. Поэтому принималась во внимание только вра-

щательная релаксация O_2 и N_2 . В силу чего $T_b/T_a = 4.272$, $n_{ib}/n_{ia} = 3.513$. Здесь и ниже индексы “ a ” и “ b ” соответствуют параметрам потока перед и за волной соответственно.

Использовалась простейшая модель со стоком энергии (см. раздел 11.3 в [16]). Процедура данного учета довольно проста. Следует подчеркнуть, что при статистическом моделировании оперируют с кинетической температурой как со средней энергией, приходящейся на соответствующие степени свободы молекулы. При равновесии по данным степеням свободы, эта температура равна соответствующей термодинамической. Каждый раз при переходе к этапу столкновений определялась полная (по всем поступательным степеням свободы) кинетическая поступательная температура (T) рассматриваемого сорта молекул в ячейке. Затем при каждом принятом после розыгрыша столкновении определялась разница (Δ) между T и температурой рассматриваемой внутренней степени свободы. Далее задавался безразмерный параметр R_r . Затем вращательная температура молекулы перед столкновением (и соответствующая вращательная энергия) менялась на произведение $R_r \Delta$ после столкновения в сторону приближения к T . При определении равновесной внутренней энергии считалось, что для вращательной энергии теплоемкость молекулы равнялась k (k — постоянная Больцмана, в используемых при моделировании единицах $k = 0.5$) и $R_r = 0.2$ для O_2 и N_2 [20], если это не оговорено отдельно. При определении скоростей пары частиц после столкновения полагалось, что изменение энергии поступательного движения рассматриваемой пары равно по абсолютной величине и противоположно по знаку изменению внутренней энергии данных частиц, т.е. относительная скорость частиц после столкновения вычислялась с учетом закона сохранения энергии.

После того как моделируемая система практически выходила на стационар, производили выборку параметров потока через интервалы времени Δt .

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Первоначально моделирование было проведено для смеси, содержащей $0.5\% \text{Xe}$. В этом случае задавалось следующее отношение концентраций компонентов H_2 , O_2 , Xe , N_2 : $1 : 0.07047 : 0.00671 : 0.2651$. На рис. 3 представлены профили относительных концентраций $n_i^0 = (n_i - n_{ia}) / (n_{ib} - n_{ia})$ и относительных кинетических температур $T_i^0 = (T_i - T_a) / (T_b - T_a)$ для H_2 (кривая 1 — n_1^0 , 2 — продольная температура (T_{1x}^0), 3 — поперечная температура (T_{1y}^0), 4 — T_1^0) и Xe (кривая 5 — n_3^0 , 6 — T_{3x}^0 , 7 — T_{3y}^0 ,

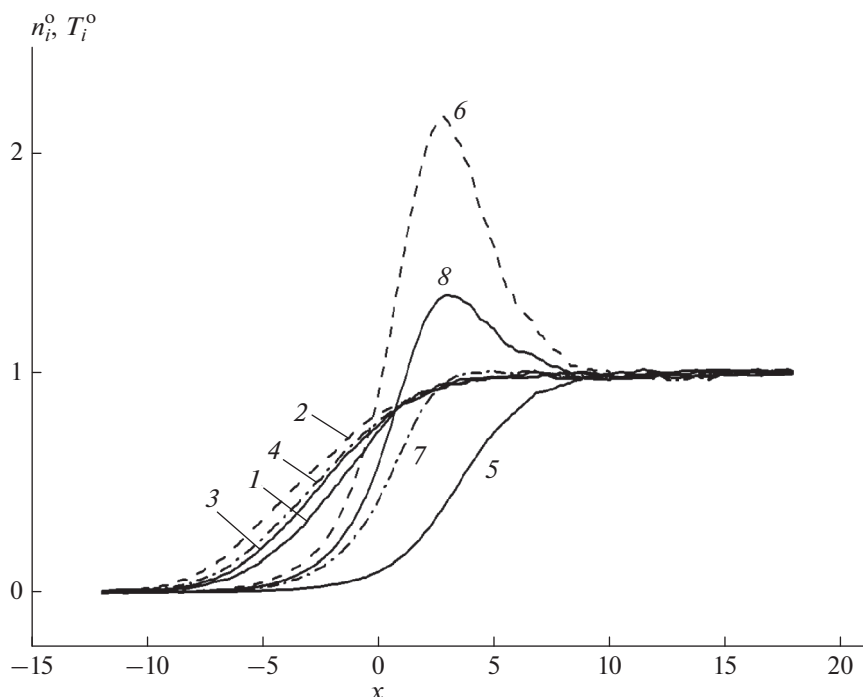


Рис. 3. Профили относительных концентраций и температур потока H_2 и Xe (пояснения см. в тексте).

$\delta - T_3^0$); T_{ix} определяется как средняя кинетическая энергия молекул вдоль потока (по оси x) с коэффициентом $0.5k$; T_{iy} определяется как полусумма средних кинетических энергий степеней свободы, перпендикулярных потоку (по осям y и z). Расстояние x , в том числе и вдоль потока, нормировано на среднюю длину свободного пробега (λ) в смеси перед волной. Время нормировано на λ/v . Здесь v – наиболее вероятная тепловая скорость молекул H_2 в потоке перед фронтом. Во всех расчетах $\Delta x = 0.15$ и $\Delta t = 0.05$.

На рис. 3 представлены результаты одной выборки после выхода моделируемой системы на стационар, что показывает состояние системы в конкретный момент времени. Отчетливо наблюдается разделение профилей концентраций компонентов во фронте волны: чем больше масса компонента, тем сильнее профиль сдвигается вправо. Аналогично ведут себя и профили T_i^0 . Следует отметить сильное превышение для Xe значений T_{3x}^0 и T_3^0 (кривые 6 и 8) во фронте над их равновесными значениями за волной. Это, как известно, связано с большой разницей масс H_2 и Xe .

На рис. 4 и 5 представлены профили параметров потоков O_2 и N_2 , которые, как и на рис. 3, представлены по результатам одной выборки после выхода моделируемой системы на стационар. Кроме профилей n_i^0 (кривые 1) и T_i^0 (кривые 4), там

приведены профили T_{ix}^0 (кривые 2), T_{iy}^0 (кривые 3) и вращательных энергий в относительных величинах: $E_{ir}^0 = (E_{ir} - E_{ar}) / (E_{br} - E_{ar})$ (кривые 5). В силу того, что молекулярные веса O_2 и N_2 близки, профили концентраций этих компонентов в количественном отношении аналогичны друг другу. Как видно, вращательные степени свободы достигают нового равновесного состояния через $(8 \div 10)\lambda$ при $x = 0$, и, следовательно, используемые ограничения при учете внутренних степеней свободы молекул вполне разумны.

На рис. 6 представлены полученные по числу выборок, равному 5000, во фронте волны распределения G_{23} : 1 – при $x = -11.925$, 2 – при $x = -0.975$, 3 – при $x = -0.525$, 4 – при $x = -0.375$, 5 – при $x = 17.325$. В конкретной пространственной ячейке перебирались все возможные пары частиц O_2 и Xe и определялись величины G_{23} . Дополнительно на рис. 6 крестиками приведено равновесное максвелловское распределение за фронтом (см. формулу (4.33) в [16]). На этом и всех последующих рисунках величины g нормированы на a_a – скорость звука в потоке перед фронтом. Эти распределения нормированы так, что интегралы от них по g равны единице. Представление о точности значений данных распределений можно получить из работы [21]. При больших g на “хвостах” распределений эта ошибка составляет не более 40%. Как видно из рис. 6, распределение вблизи правой границы области моделирования (кривая 5)

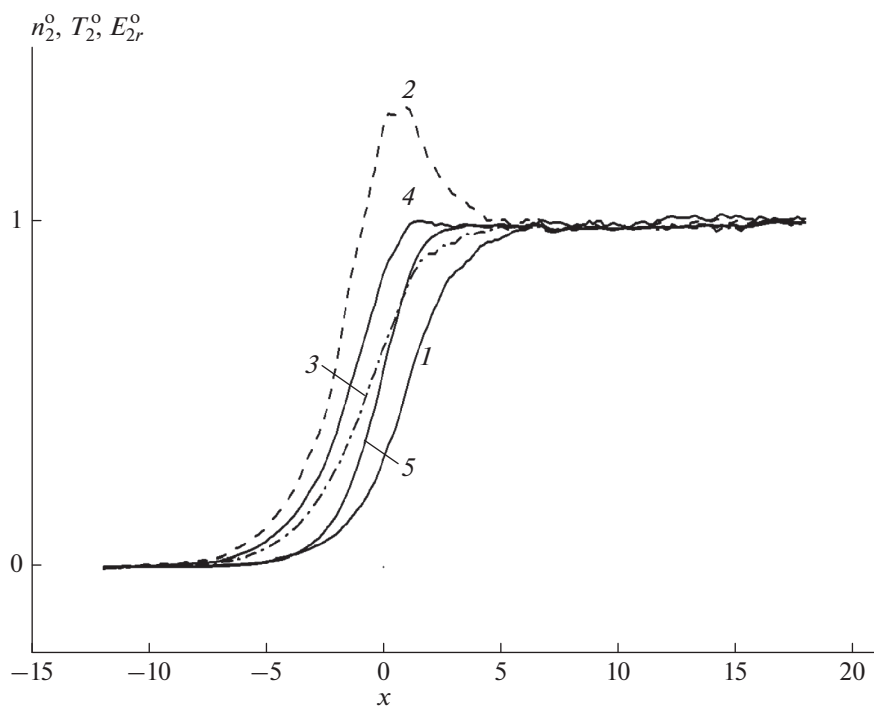


Рис. 4. Профили относительных концентраций, температур и вращательных энергий потока O_2 (пояснения см. в тексте).

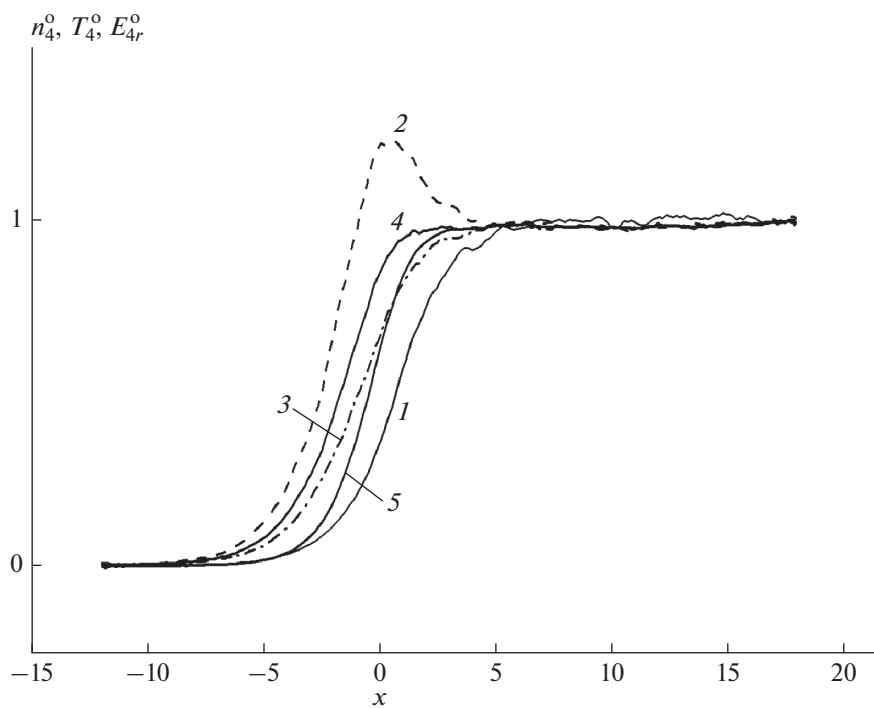


Рис. 5. То же, что и на рис. 4, для профилей параметров потока N_2 .

удовлетворительно совпадает с максвелловским распределением за фронтом (крестики). В данном случае величина $MG = 500$. Это значение MG получено на пределе возможностей определения

в численном эксперименте “хвостов” G_{23} . При этом величины g соответствуют примерно половине энергии диссоциации O_2 . Как показывают результаты представленных выше исследований

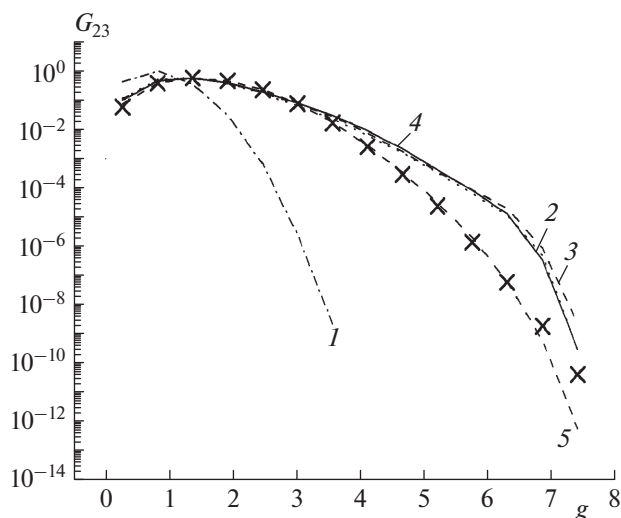


Рис. 6. Распределения G_{23} по g во фронте ударной волны для случая смеси с добавкой 0.5% Хе.

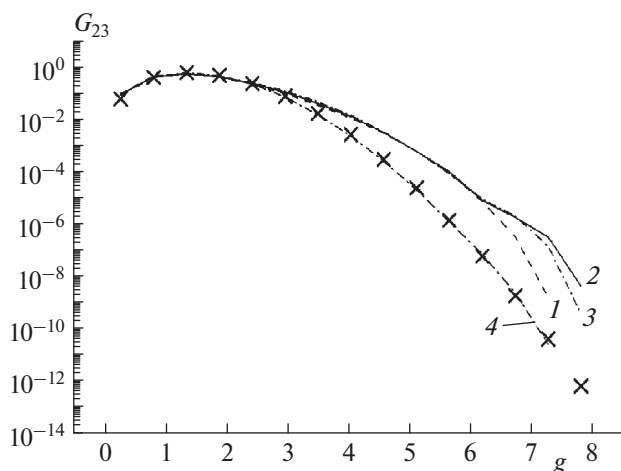


Рис. 7. Распределения G_{23} по g во фронте ударной волны для случая смеси с добавкой 0.25% Хе.

(в том числе и приведенных ранее в [9–11]), такого уровня значений MG достаточно для сдвига порога детонации в сторону условий, более неблагоприятных для ее возникновения в случае рассматриваемой смеси.

Затем моделирование было проведено для смеси, содержащей 0.25% Хе. В этом случае задавалось следующее отношение концентраций компонентов H_2 , O_2 , Хе, N_2 : 1 : 0.0689 : 0.003344 : 0.267558. Полученные профили параметров потока очень близки к представленным на рис. 3–5, только сдвинуты вправо на величину λ и поэтому не приводятся. На рис. 7 показаны распределения G_{23} во фронте, полученные по числу выборок, равному 8000: кривая 1 – при $x = 0.825$, 2 – при $x = 0.975$, 3 – при $x = 1.125$, 4 – при $x = 17.325$, крестики – равновесное

максвелловское распределение за фронтом. Как и выше, распределение вблизи правой границы области моделирования (кривая 5) хорошо совпадает с максвелловским распределением за фронтом (крестики). Величина MG в этом случае равна 7800. Более чем 15-кратное увеличение MG , несмотря на 2-кратное уменьшение концентрации одного из сталкивающихся компонентов (Хе), приводит как минимум к 7-кратному увеличению высокоэнергетических столкновений и, соответственно, к увеличению скорости цепного химического процесса и к немонотонной зависимости от концентрации Хе сдвига порога детонации в сторону условий, более неблагоприятных для ее возникновения. Эти результаты соответствуют представленным выше результатам экспериментов.

При моделировании для учета вращательной релаксации использовалась модель со стоком энергии. Единственный параметр этой модели, а именно R_r , хотя и задан равным 0.2, исходя из разумных соображений [20], но в определенной степени является неопределенным. Для оценки влияния значения R_r на конечные результаты были повторены расчеты со значением $R_r = 0.1$ как для смеси с 0.5% Хе, так и для смеси с 0.25% Хе. На рис. 8 показаны профили параметров потоков O_2 для смеси с 0.5% Хе: 1 – n_2^0 , 2 – T_{2x}^0 , 3 – T_{2y}^0 , 4 – T_2^0 , 5 – E_{2r}^0 . Как видно (ср. кривые 1 и 5 на рис. 4 и 8), вращательная релаксация замедляется. Кроме того, касательная для кривой 5 на рис. 4 имеет максимальное значение тангенса угла наклона, равное 3.45, а на рис. 8 – 3.12. Следовательно, касательная с максимальным наклоном при $R_r = 0.1$ более пологая, что дополнительно свидетельствует о замедлении вращательной релаксации в этом случае. Это естественно, так как при $R_r = 0.1$ для каждого разыгранного столкновения вращательная энергия изменяется на величину, меньшую в 2 раза. В данном случае $MG = 900$. Моделирование, выполненное для смеси с 0.25% Хе и $R_r = 0.1$ дало значение $MG = 4700$. Следовательно, и при $R_r = 0.1$ 2-кратное уменьшение концентрации Хе приводит к 5-кратному увеличению MG , как минимум к 2.5-кратному увеличению высокоэнергетических столкновений и, соответственно, к возможной немонотонной зависимости от концентрации Хе сдвига порога детонации в сторону условий, более неблагоприятных для ее возникновения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально полученный факт немонотонной зависимости от концентрации Хе сдвига порога детонации в сторону более неблагоприятных условий возникновения детонации обусловлен спецификой поступательной неравновесности, имеющей место во фронте ударной волны

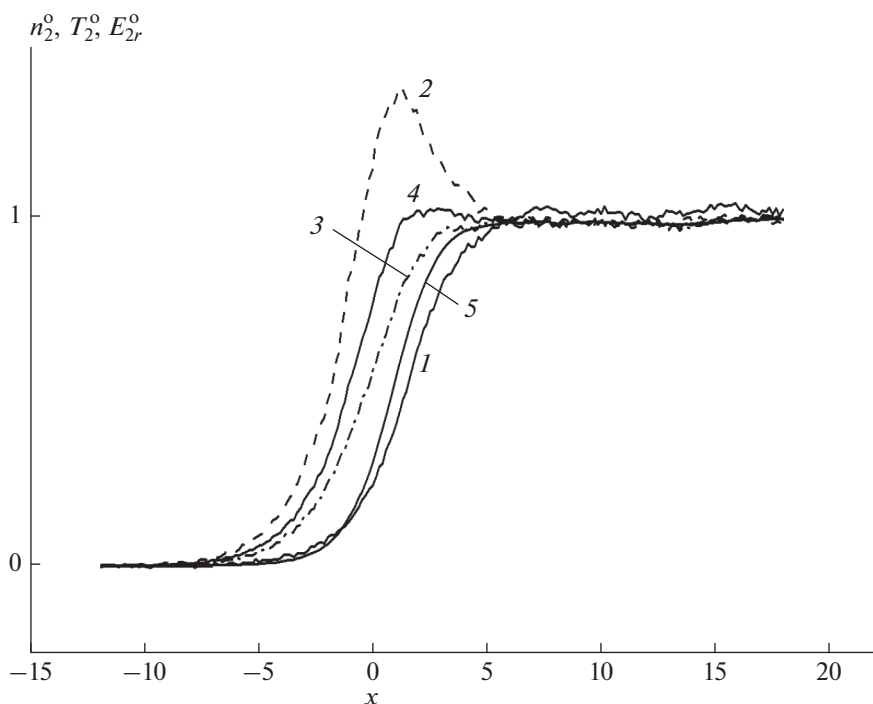


Рис. 8. То же, что и на рис. 4, для смеси с добавкой 0.5% Xe при $R_r = 0.1$.

для рассмотренных выше ситуаций, и более ни с чем не связан. Это случай сильного проявления эффекта поступательной неравновесности во фронте УВ для смесей, в которых в отличие от экспериментов работ [9, 11] основным легким газом является не He, а H_2 с вращательными и колебательными степенями свободы, и умеренно тяжелые газы (O_2 и N_2) имеют значительно большую концентрацию. Данные обстоятельства не привели к исчезновению влияния неравновесности. Все это указывает на довольно большую область условий существования данного эффекта. Удалось обнаружить новый состав, у которого проявляется влияние поступательной неравновесности на протекание цепного разветвленного процесса.

Приведенные выше результаты моделирования показали, что в условиях проведенных экспериментов с учетом вращательных степеней свободы O_2 и N_2 при уменьшении концентрации Xe в 2 раза сильно возрастают величины MG и, соответственно, частоты высокоэнергетических столкновений. Это обусловлено специфической поступательной неравновесностью во фронте УВ и вполне может привести к немонотонной зависимости от концентрации Xe сдвига порога детонации в сторону условий, более неблагоприятных для ее возникновения, что и показано экспериментально.

Постановка представленного эксперимента по сравнению с аналогичными предыдущими [9, 11]

гораздо ближе к условиям аварийных ситуаций на АЭС, где при нештатных случаях в воздушную атмосферу машинного зала может выделяться в малом количестве Xe и в большом — H_2 .

Полученный результат во многом обусловлен поиском эффекта поступательной неравновесности в области критических условий при протекании разветвленных цепных реакций, а именно в области срыва детонационного процесса. Как раз в такой ситуации и проявляются такие тонкие эффекты.

Авторы благодарны Межведомственному суперкомпьютерному центру РАН за предоставление вычислительных ресурсов. Авторы также благодарят Ю.П. Мягкова за помощь при проведении экспериментов и О.Н. Тернову за помощь при обработке результатов расчетов и при проведении экспериментов.

Работа выполнена по темам госзаданий (регистрационные номера 0089-2014-0018 и 0089-2019-0017).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Азатян В.В., Прокопенко В.М., Чапышева Н.В., Абрамов К.С. // Хим. физика. 2018. Т. 37. № 1. С. 71.
2. Тереза А.М., Андержанов Э.К. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 8. С. 58.
3. Власов П.А., Демиденко Т.С., Смирнов В.Н., Тереза А.М., Аткин Э.В. // Хим. физика. 2016. Т. 35. № 11. С. 54.

4. *Vazhenova T.V., Emelianov A.V., Eremin A.V., Velicodny V.Y.* // Proc. ISSW-21 / Ed. Howling A. Australia: Great Keppel, 1998. P. 195.
5. *Великодный В.Ю., Емельянов А.В., Еремин А.В.* // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 10. С. 23.
6. *Емельянов А.В., Ерёмин А.В., Куликов С.В.* // ЖТФ. 2013. Т. 83. Вып. 5. С. 24.
7. *Диваков О.Г., Еремин А.В. Зиборов В.С., Фортвов В.Е.* // Докл. АН. 2000. Т. 373. № 4. С. 487.
8. *Великодный В.Ю., Битюрин В.А.* // Хим. физика. 1997. Т. 16. № 9. С. 14.
9. *Куликов С.В., Манелис Г.Б.* // Докл. АН. 2002. Т. 382. № 5. С. 641.
10. *Куликов С.В., Манелис Г.Б., Терновая О.Н.* // Хим. физика. 2007. Т. 26. № 6. С. 73.
11. *Куликов С.В., Червонная Н.А.* // Хим. физика. 2018. Т. 37. № 1. С. 66.
12. *Додулат О.И., Клосс Ю.Ю., Черемисин Ф.Г.* Физико-химическая кинетика в газовой динамике. Электр. журн. 2013. Т. 14. Вып. 1; <http://www.chemphys.edu.ru>
13. Сб. статей “Ударные трубы” / Под ред. Рахматуллина Х.А., Семенова С.С. М.: Изд-во иностр. лит., 1962.
14. *Зельдович Я.Б., Генич А.П., Манелис Г.Б.* // Докл. АН СССР. 1979. Т. 248. № 2. С. 349.
15. *Kulikov S.V.* // Shock Waves. 1997. V. 7. № 1. P. 25.
16. *Берд Г.* Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981.
17. *Куликов С.В., Берзигияров П.К.* // Вычисл. методы и програм. 2002. Т. 3. № 2. С. 51.
18. *Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Сериков В.В., Яницкий В.Е.* // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1986. Т. 26. № 12. С. 1839.
19. *Гейдон А., Герл И.* Ударная труба в химической физике высоких температур. М.: Мир, 1966.
20. *Богданов А.В., Дубровский Г.В., Осипов А.И., Стрельчя В.М.* Вращательная релаксация в газах и плазме. М.: Энергоатомиздат, 1991.
21. *Куликов С.В.* // Матем. моделирование. 1999. Т. 11. № 3. С. 96.