

в рабочем теле, видимо, недопустимо, так как может даже привести к срыву генерации. Выявленные уровни составляющих двухфазных потерь могут менять относительное значение. Так, например, при снижении размеров частиц уменьшаются оптические потери, но растут релаксационные.

Как показали отдельные расчеты, такой вид потерь, как газодинамические, для сажистых частиц практически не имеет места из-за равенности скоростей и температур газа и частиц. Повышение же статической температуры за счет гетерогенной дезактивации колебательно-возбужденного газа наблюдается в заметном масштабе только при 10%-ой концентрации частиц и вероятностях гетерогенной дезактивации $P^* = 1$.

Авторы выражают благодарность А. В. Захарову и В. Л. Глясу за помощь, оказанную при проведении экспериментов.

Поступила в редакцию 27/1 1983

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. Б. Пальмер, Н. Ф. Кюллис.— В кн.: Химические и физические свойства/Под ред. Р. Уокера. М.: Химия, 1970.
2. В. М. Шмелев, А. Д. Марголин. Квантовая электроника, 1975, 2, 8.
3. С. А. Лосев. Газодинамические лазеры. М.: Наука, 1977.
4. В. К. Конюхов, В. Н. Файзулаев. Квантовая электроника, 1974, 1, 12.
5. В. Н. Файзулаев. Препринт ФИАН. № 128, 1979.
6. В. Н. Файзулаев. ПМТФ, 1981, 1.
7. R. A. Dobbins, L. Jizmoqian. J. OSA, 1966, 56, 10.
8. В. А. Архипов, Г. С. Ратанов. ФГВ, 1979, 15, 2.
9. А. С. Борейшо, А. Ф. Леонов.— В кн.: Теплофизические исследования/Под ред. С. С. Кутателадзе. Новосибирск, 1977.
10. V. R. Stull, G. N. Plass. J. OSA, 1960, 50, 12.
11. В. И. Букатый, А. М. Сагалаков, А. А. Тельнихин и др. ФГВ, 1979, 15, 6.
12. Ю. С. Вагин. Тр. ФИАН. Т. 113. М.: Наука, 1979.
13. М. Г. Ксталхерман, В. М. Мальков, А. Ю. Шевырин и др. ФГВ, 1979, 15, 6.

ПРИБЛИЖЕННОЕ УРАВНЕНИЕ КИНЕТИКИ В ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМАХ ТИПА ГАЗ — КОНДЕНСИРОВАННАЯ ФАЗА

Ю. А. Николаев, П. А. Фомин
(Новосибирск)

При численных, особенно неоднородных, расчетах движения продуктов сгорания углеводородов при существующих возможностях ЭВМ точный учет полной системы кинетических уравнений или уравнений равновесия трудно осуществим. В этой связи для расчетов сложных двухфазных течений, как правило, используются модельные кинетические уравнения [1—5], точность которых оставляет желать лучшего.

При квазиравновесном протекании реакции для замыкания системы уравнений газодинамики достаточно представить полную внутреннюю энергию и молекулярную массу через температуру и давление. Для гомогенных систем в [6, 7] предложены приближенные формулы, погрешность которых в основном связана с упрощенным описанием термодинамической части внутренней энергии. В настоящей работе эта модель развита, улучшено описание термодинамической части внутренней энергии, благодаря чему повышена точность. Показана возможность применения модели в гетерогенных системах.

Введем обозначения: U , U_T , U_x — полная внутренняя энергия газа на единицу массы, ее термодинамическая и химическая составляющие соответственно; E — средняя энергия диссоциации продуктов реакции; R — газовая постоянная; ρ , T — плотность и температура газа, соответственно; μ — молекулярная масса газа; μ_a , μ_{min} , μ_{max} — молекулярные

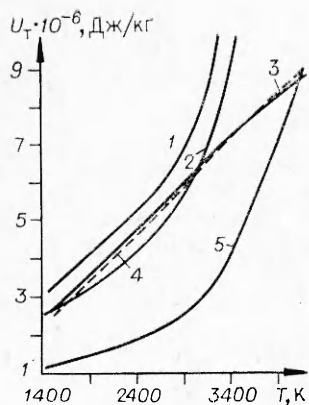


Рис. 1. Зависимость термодинамической части внутренней энергии при равновесном составе от температуры при $p = 1$ атм.

1 — [8], с $\tilde{\gamma}_f = 1,21$; 2 — [8], с $\tilde{\gamma}_f = 1,26$; 3 — (1) при $\Theta = 2500$ К; 4 — точное значение; 5 — [8], с $\tilde{\gamma}_f = 1,57$.

массы газа в атомарном, предельно диссоциированном и рекомбинированном состоянии соответственно.

Уточнение U_t основывается на анализе зависимости среднего числа степеней свободы молекул от состава и температуры. Отметим, что используемое в [7] понятие предельно диссоциированного состояния не всегда соответствует атомарному состоянию (например,

N_2 и CO считаются не диссоциирующими). Число степеней свободы i одно-, двух- и трехатомных молекул равно $3, 6 \pm 1$ и 9 ± 3 соответственно, приближаясь к верхнему пределу с ростом температуры. Видно, что эти средние значения пропорциональны числу атомов в молекуле. Если характеристические температуры Θ возбуждения колебательных степеней свободы для трехатомных молекул в смеси близки, то, учитывая, что среднее число атомов в молекулах равно μ/μ_a , можно приближенно записать

$$U_t = [3 + (3 + 6 \exp(-\Theta/T))(\mu/\mu_a - 1)/2]RT/2\mu. \quad (1)$$

Точность этой формулы порядка одной степени свободы. Средняя характеристическая температура возбуждения колебательных степеней свободы трехатомных молекул должна быть сравнимой с порогом диссоциации, который для широкого класса смесей составляет величину ≈ 2500 К. Результаты расчетов U_t с $\Theta = 2000$ и 2500 К примерно одинаково отличаются от результатов точных расчетов.

Характеристические температуры компонентов продуктов реакции $2H_2 + O_2$ сильно отличаются друг от друга [8], тем не менее формула (1) дает хорошее соответствие приближенных и точных расчетов (рис. 1, 2), что свидетельствует об ее универсальности. Для полной внутренней энергии $U = U_t + U_x$ в соответствии с [6, 7] и с учетом (1) получим (рис. 3)

$$U = 1,5[1 + (0,5 + \exp(-2500/T))(\mu/\mu_a - 1)]RT/\mu + E(1/\mu - 1/\mu'), \quad (2)$$

где $\mu' = \mu_a, \mu_{\min}$ или μ_{\max} при отсчете U_x от атомарного, предельно диссоциированного или рекомбинированного состояния соответственно. Сов-

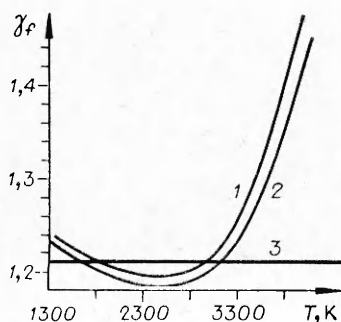


Рис. 2. Зависимость показателя «замороженной» адиабаты (отношение теплоемкостей) для равновесного состава от температуры при $p = 1$ атм. 1 — полученная дифференцированием (1) при $\Theta = 2500$ К; 2 — точное значение; 3 — [7], с $\gamma_f = 1,21$.

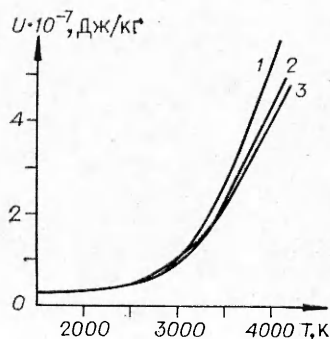


Рис. 3. Зависимость полной внутренней энергии при равновесном составе от температуры при $p = 1$ атм.

1 — [7], с $\tilde{\gamma}_f = 1,21$; 2 — по (2); 3 — точное значение.

местно с уравнением равновесия [7]

$$\rho(1 - \mu/\mu_{\max})^2/\mu(\mu/\mu_{\min} - 1) \cdot \exp(E/RT) = K = \text{const}, \quad (3)$$

которое позволяет найти явную зависимость $\mu(\rho, T)$ (квадратное уравнение), (2) позволяет найти явную зависимость $U(\rho, T)$. Модель (2) в употреблении не сложнее [6, 7], но не содержит произвола в выборе эффективного показателя «замороженной» адиабаты γ_i . Ясно, что (2) с тем же успехом может применяться и с приближенным уравнением кинетики [6].

Для гетерогенных систем газ — конденсированное вещество (например, капли или пленка жидкости) с реакцией лишь в газовой фазе величины μ_{\max} , μ_{\min} , μ_a , E и K (или K_+ и A при использовании [6]) являются переменными, зависящими от количества испарившегося конденсированного вещества. Кроме того, необходима поправка в (2), учитывающая сдвиг начала отсчета U_x . Если расчет первых четырех величин не составляет труда (по методике [7]), то величина K может быть задана лишь приближенно, например путем аппроксимации точных расчетов при характерных температурах и давлениях. Однако неплохие результаты дает упрощенная модель, в которой E и K (или K_+ и A) полагаются постоянными.

Оценим, как на точность расчета температуры в адиабате при заданном ρ влияют погрешности задания E и K . Варьируя уравнения (2), (3) при $U = \text{const}$, $\rho = \text{const}$, после преобразований получим

$$\delta \ln T = (a_1 \delta \ln E - a_2 \delta \ln K)/a_3, \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} a_1 &= E/RT \cdot [a_2 - 2/3 \cdot (1 - \mu/\mu_{\max})], \\ a_2 &= \Lambda(E/RT + 0,5 - \exp(-\Theta/T)), \\ a_3 &= E/RT \cdot a_2 + 1 + (0,5 + (1 + \Theta/T) \exp(-\Theta/T))(\mu/\mu_a - 1), \\ \Lambda &= (\mu_{\max} - \mu)(\mu - \mu_{\min})/[2\mu\mu_{\max} - \mu_{\max}(\mu + \mu_{\max})]. \end{aligned}$$

Для низких температур ($\mu \approx \mu_{\max}$) $a_1 \ll 1$, $a_2 \ll 1$, $a_3 \approx 2$, для средних температур ($\sim 2000 \div 4500$ К), т. е. при не слишком сильно развитой диссоциации ($\Lambda(E/RT)^2 > 1$) имеем $a_1 \approx a_3 \approx E/RT \cdot a_2$, и при более высоких температурах $(\mu/\mu_{\min} - 1) < (RT/E)^2 \approx 0,01$

$$a_1 \approx 2/3 \cdot (1 - \mu_{\min}/\mu_{\max})E/RT \approx 5, \quad a_2 \ll 1, \quad a_3 \approx 1.$$

Таким образом, в реальных условиях применения модели

$$\delta \ln T \approx \delta \ln E - RT/E \cdot \delta \ln K. \quad (5)$$

Исследуя с помощью (5) таблицу¹ в [7], получим, что применение величин E и K , вычисленных для смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$, для продуктов реакций смесей $(1 \div 4)\text{H}_2 + \text{O}_2 + (0 \div 4)\text{N}_2$ вызовет ошибку по температуре не более 8%; использование для продуктов реакции смеси $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$ величин E и K , вычисленных для смеси $\text{C}_2\text{H}_2 + 2,5\text{O}_2$ или $2\text{H}_2 + \text{O}_2$, вызовет ошибки по температуре менее 1 и 5% соответственно. Отметим, что погрешности E и K , как правило, частично взаимоуничтожаются.

Можно рекомендовать выбирать константы E и K по [7] для состава, близкого к тому, который бы имел место после однородного по пространству полного испарения конденсированной фазы.

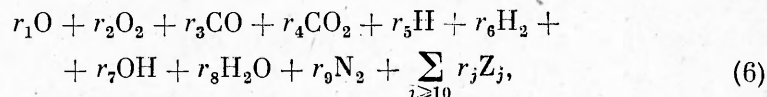
Пусть конденсированная фаза имеет среднюю молекулярную массу μ_k , удельную (на единицу массы) внутреннюю энергию $U_{k(a)}$, термодинамическая часть которой отсчитывается от состояния в газовой фазе при нулевой (по Кельвину) температуре, а химическая — от атомарного состояния, и состав, характеризующийся тем, что при переводе одного моля конденсированной фазы в атомарное состояние получим n_1 молей ато-

¹ В таблице [7] множитель перед K должен быть 10^{-3} .

мов O, n_2 — C, n_3 — H, n_4 — N и n_i ($i \geq 10$) молей одноатомных инертных веществ Z_i .

Аналогично, пусть газовая фаза в исходной гетерогенной смеси имеет внутреннюю энергию $U_{д(а)}^0$, отсчитанную от того же уровня, что и в конденсированной фазе, среднюю молекулярную массу μ^0 и состав, характеризующийся тем, что при переводе моля газа (массой μ^0) в атомарное состояние получим m_1 молей O, m_2 — C, m_3 — H, m_4 — N и m_i — Z_i , при этом $m_1 \geq m_2$.

Будем полагать, что продукты реакции после периода индукции (только тогда пригодны модели [6, 7]) имеют состав (не обязательно равновесный):



где r_i — мольные доли веществ ($\sum_i r_i = 1$).

В атомарном состоянии газовая фаза, имея молекулярную массу

$$\mu_a = \mu \left(r_1 + 2r_2 + 2r_3 + 3r_4 + r_5 + 2r_6 + 2r_7 + 3r_8 + 2r_9 + \sum_{i \geq 10} r_i \right),$$

может содержать лишь атомы O, C, H, N, Z_i , в предельно диссоциированном состоянии (молекулярная масса $\mu_{\min} = \mu / (r_1 + 2r_2 + r_3 + 2r_4 + r_5 + 2r_6 + 2r_7 + 3r_8 + r_9 + \sum_{i \geq 10} r_i)$) — молекулы CO, N_2 и атомы O (мольная доля β), H, Z_i , в предельно рекомбинированном состоянии (молекулярная масса μ_{\max}) — либо (при избытке кислорода) молекулы CO_2 , H_2O , O_2 (мольная доля α_1), N_2 и атомы Z_i , $\mu_{\max} = \mu / (r_1/2 + r_2 + r_3/2 + r_4 + r_5/4 +$

$+ r_6/2 + 3r_7/4 + r_8 + r_9 + \sum_{i \geq 10} r_i)$, либо (при недостатке кислорода) — молекулы CO_2 , H_2O , CO (мольная доля α_2), H_2 (мольная доля α_3), N_2 и атомы Z_i , $\mu_{\max} = \mu / (r_2 + r_4 + r_5/2 + r_6 + r_7/2 + r_8 + r_9 + \sum_{i \geq 10} r_i)$.

Введем величину α , при недостатке кислорода равную $-(\alpha_2 + \alpha_3)/2 \leq 0$, а при избытке кислорода $\alpha_1 \geq 0$. Таким образом, состав газовой фазы будет характеризоваться величинами μ_a , μ_{\min} , μ_{\max} , μ , α , β и

$$\mu_a^0 = \mu^0 \left(m_1 + m_2 + m_3 + m_4 + \sum_{i \geq 10} m_i \right),$$

$$\mu_{\min}^0 = \mu^0 \left(m_1 + m_3 + m_4/2 + \sum_{i \geq 10} m_i \right),$$

$$\beta^0 = (m_1 - m_2) \mu_{\min}^0.$$

Если

$$m_1 \geq 2m_2 + m_3/2,$$

то

$$\mu_{\max}^0 = \mu^0 \left(m_1/2 + m_2/4 + m_4/2 + \sum_{i \geq 10} m_i \right),$$

$$\alpha^0 = (m_1/2 - m_2 - m_3/4) \mu_{\max}^0 / \mu^0,$$

иначе

$$\mu_{\max}^0 = \mu^0 \left(m_2 + m_3/2 + m_4/2 + \sum_{i \geq 10} m_i \right),$$

$$\alpha^0 = 0,5(m_1 - 2m_2 - m_3/2) \mu_{\max}^0 / \mu^0$$

для текущего и исходного состояния гетерогенной смеси соответственно. Конденсированная фаза не меняет своего состава и характеризуется ве-

личинами:

$$\mu_a^* = \mu_K \left(n_1 + n_2 + n_3 + n_4 + \sum_{i \geq 10} n_i \right).$$

Если $\mu_K/\mu_a^* \neq n_2$, то

$$\mu_{\min}^* = \mu_K \left(n_1 + n_3 + n_4/2 + \sum_{i \geq 10} n_i \right), \quad (7)$$

$$\mu_{\max}^* = \mu_K \left(n_1/2 + n_3/4 + n_4/2 + \sum_{i \geq 10} n_i \right),$$

$$\alpha^* = (n_1/2 - n_2 - n_3/4) \mu_{\max}^* / \mu_K,$$

$$\beta^* = (n_1 - n_2) \mu_{\min}^* / \mu_K.$$

Если $\mu_K/\mu_a^* = n_2$, то

$$\mu_{\max}^{**} = \mu_K \left(n_2 + n_3/2 + n_4/2 + \sum_{i \geq 10} n_i \right),$$

$$\alpha^{**} = (n_1/2 - n_2 - n_3/4) \mu_{\max}^{**} / \mu_K.$$

Пусть за единицу времени в единице объема в газовую фазу из конденсированной фазы перешла масса J вещества. В исходной порции газа массой ρ содержалось ρ/μ_a , ρ/μ_{\min} и ρ/μ_{\max} молей в атомарном, предельно диссоциированном и рекомбинированном состоянии соответственно. Новая порция газа имеет массу $J + \rho$, в атомарном состоянии она содержит $\rho/\mu_a + J/\mu_K \cdot (n_1 + n_2 + n_3 + n_4 + \sum_{i \geq 10} n_i)$ молей различных атомов, в предельно диссоциированном состоянии, если $\beta > 0$ или $n_1 \geq n_2$, содержит $\rho/\mu_{\min} + J/\mu_K \cdot (n_1 + n_3 + n_4/2 + \sum_{i \geq 10} n_i)$ молей атомов и молекул, при этом число атомов кислорода составит $\rho/\mu_{\min} \cdot \beta + J/\mu_K \cdot (n_1 - n_2)$. В предельно рекомбинированном состоянии при избытке кислорода общее число молей веществ составит $\rho/\mu_{\max} + J/\mu_K \cdot (n_1/2 + n_3/4 + n_4/2 + \sum_{i \geq 10} n_i)$, число молей $O_2 - \rho/\mu_{\max} \cdot \alpha + J/\mu_K \cdot (n_1/2 - n_2 - n_3/4)$, при недостатке кислорода общее число молей веществ составит $\rho/\mu_{\max} + J/\mu_K \cdot (n_2 + n_3/2 + n_4/2 + \sum_{i \geq 10} n_i)$, число молей H_2 и $CO - \rho/\mu_{\max} \cdot 2(-\alpha) + J/\mu_K \cdot (-n_1 + 2n_2 + n_3/2)$.

Отсюда легко получить систему дифференциальных уравнений:

$$\frac{d\mu_a}{dt} = -\mu_a/\mu_a^* \cdot J/\rho \cdot (\mu_a - \mu_a^*);$$

если $\mu_K/\mu_a^* = n_2$, то

$$\frac{d\mu_{\min}}{dt} = \mu_{\min} J/\rho,$$

$$\frac{d\beta}{dt} = -\mu_{\min}/\mu_a^* \cdot J/\rho,$$

иначе

$$\frac{d\mu_{\min}}{dt} = -\mu_{\min}/\mu_{\min}^* \cdot J/\rho \cdot (\mu_{\min} - \mu_{\min}^*), \quad (8)$$

$$\frac{d\beta}{dt} = -\mu_{\min}/\mu_{\min}^* \cdot J/\rho \cdot (\beta - \beta^*);$$

при $(\alpha > 0) \cup ((\alpha = 0) \cap (\alpha^0 < 0)) \cup ((\mu_K/\mu_a^* \neq n_2) \cap (\alpha = \alpha^0 = 0) \cap (\alpha^* > 0))$: если $\mu_K/\mu_a^* = n_2$, то

$$\frac{d\mu_{\max}}{dt} = \mu_{\max} J/\rho,$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = \mu_{\max}/\mu_{\max}^{**} \cdot \alpha^{**} J/\rho,$$

иначе

$$\frac{d\mu_{\max}}{dt} = -\mu_{\max}/\mu_{\max}^* \cdot J/\rho \cdot (\mu_{\max} - \mu_{\max}^*),$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = -\mu_{\max}/\mu_{\max}^* \cdot J/\rho \cdot (\alpha - \alpha^*);$$

при $(\alpha < 0) \cup ((\alpha = 0) \cap (\alpha^0 > 0)) \cup ((\alpha = \alpha^0 = 0) \cap$
 $\cap ((\mu_{\kappa}/\mu_a^* = n_1) \cup (\alpha^{**} < 0)))$: если $\mu_{\kappa}/\mu_a^* = n_1$, то

$$\frac{d\mu_{\max}}{dt} = \mu_{\max} J/\rho,$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = \mu_{\max}/\mu_{\max}^* \cdot \alpha^* J/\rho,$$

иначе

$$\frac{d\mu_{\max}}{dt} = -\mu_{\max}/\mu_{\max}^{**} \cdot J/\rho \cdot (\mu_{\max} - \mu_{\max}^{**}),$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = -\mu_{\max}/\mu_{\max}^{**} \cdot J/\rho \cdot (\alpha - \alpha^{**}).$$

Описание межфазного массового потока J не входит в задачу данной работы, будем лишь предполагать, что $J > 0$. Тогда все неизвестные функции в (8) монотонны. При равенстве нулю правой части какого-либо уравнения соответствующая величина не меняется. Если α и α^* (или α^{**}) разных знаков, то возможна смена знака величины α , по (вследствие монотонности) только один раз. За величиной α следует следить только при возможности переключения уравнений ($\alpha^0 \alpha^* < 0$) и только до переключения. В процессе счета, если $\beta^* < 0$, возможна смена знака (с + на -) величины β (поскольку $m_1 \geq m_2$, то $\beta^0 > 0$). Физически это означает конденсацию углерода. Эффект конденсации будет рассмотрен ниже.

В зависимости от равенства нулю правых частей уравнений система (8) может быть сведена к одному дифференциальному уравнению типа

$$\frac{d \ln |(f - f^*)/(1 - v + vf)|}{dt} = (-1)^i J/\rho, \quad (9)$$

где l, v равны 0 или 1, f может принимать значения $\mu_a, \mu_{\min}, \mu_{\max}, \alpha$ или β , и системе дифференциальных уравнений с разделяющимися переменными

$$d \ln |1 - x^*/x| = d \ln |1 - y^*/y|,$$

$$d \ln |x - x^*| = d \ln |y - y^*|,$$

$$d \ln |x - x| = qd \ln |1 - y^*/y|,$$

$$d \ln |1 - x^*/x| = -d \ln |y|,$$

$$\kappa dx = dy,$$

где $q = \pm 1$, решением которых при начальном условии $x = x^0$ при $y = y^0$ являются функции

$$\begin{aligned} x &= x^*/[1 - (1 - x^*/x^0)(1 - y^*/y)/(1 - y^*/y^0)], \\ x &= x^* + (x^0 - x^*)(y - y^*)/(y^0 - y^*), \\ x &= x^* + (x^0 - x^*)(1 - y^*/y)/(1 - y^*/y^0), \\ x &= x^*/\{1 - y^0/y \cdot (1 - x^*/x^0)\}, \\ x &= x^0 + 1/\kappa \cdot (y - y^0). \end{aligned} \quad (10)$$

Смысл формальных переменных в (9), (10) зависит от исходного и, возможно, от текущего состава гетерогенной смеси и, как следует из анализа (8), может быть описан следующими условиями (цифры под фигурными скобками приведены для удобства чтения).

В исходном состоянии² положим индексы j и j_B равными нулю.
Условие А:

если $\{\mu_K/\mu_a^* = n_2\}$, то $\{f \equiv \mu_{\min}, f^* = 0, v = 0, l = 0, f^0 = \mu_{\min}^0,$
 $\mu_a = \mu_a^*/[1 - \mu_{\min}^0/\mu_{\min} \cdot (1 - \mu_a^*/\mu_a^0)]\}$, $\beta = \beta^0 - (\mu_{\min} - \mu_{\min}^0)/\mu_a^*\}$,
 иначе {если $\{\mu_a^0 = \mu_a^*\}$, то $\{\mu_a \equiv \mu_a^0\}$, иначе $\{f \equiv \mu_a, f^* = \mu_a^*, f^0 = \mu_a^0,$
 $v = 1, l = 1\}$, если $\{\mu_{\min}^0 = \mu_{\min}^*\}$, то $\{\mu_{\min} \equiv \mu_{\min}^0\}$, если $\{(\beta^* < 0) \cap$
 $\cap (\mu_a^0 \neq \mu_a^*)\}$, то $\{\beta = \beta^* + (\beta^0 - \beta^*)(1 - \mu_a^*/\mu_a)/(1 - \mu_a^*/\mu_a^0)\}$,
 иначе {если $\{\mu_a^0 = \mu_a^*\}$, то $\{f \equiv \mu_{\min}, f^* = \mu_{\min}^*, f^0 = \mu_{\min}^0, v = 1, l = 1\}$,
 иначе $\{\mu_{\min} = \mu_{\min}^*/[1 - (1 - \mu_{\min}^*/\mu_{\min}^0)(1 - \mu_a^*/\mu_a)/(1 - \mu_a^*/\mu_a^0)]\}$,
 если $\{\beta^* < 0\}$, то $\{\beta = \beta^* + (\beta^0 - \beta^*)(\mu_{\min} - \mu_{\min}^*)/(\mu_{\min}^0 - \mu_{\min}^*)\}$.

Условие В:

если $\{(j_B = 0) \cap (\mu_K/\mu_a^* \neq n_1) \cap ((\mu_K/\mu_a^* \neq n_2) \cup (\alpha^0 \geq 0))\}$,
 то {если $\{(\alpha^0 > 0) \cup ((\alpha^0 = 0) \cap (\alpha^* \geq 0))\}$, то $\{\tilde{\mu}_{\max} = \mu_{\max}^*, \tilde{\alpha} = \alpha^*\}$,
 иначе $\{\tilde{\mu}_{\max} = \mu_{\max}^{**}, \tilde{\alpha} = \alpha^{**}, j_B = 1\}$.

Условие С:

если $\{\mu_K/\mu_a^* = n_2\}$, то {если $\{(\alpha^0 \leq 0) \cup (j \neq 0)\}$, то $\{\mu_{\max} =$
 $= \mu_{\max}^{**}/[1 - \mu_{\min}^j/\mu_{\min} \cdot (1 - \mu_{\max}^{**}/\mu_{\max}^j)]\}$, иначе $\{\mu_{\max} = \mu_{\max}^0 \mu_{\min}^0/\mu_{\min}^j,$
 $\alpha = \alpha^0 + \alpha^{**}/\mu_{\max}^{**} \cdot (\mu_{\max} - \mu_{\max}^0)\}$, если $\{(\mu_K/\mu_a^* = n_1) \cap (\alpha^0 < 0) \cap$
 $\cap (j = 0)\}$, то {если $\{(\mu_a^0 = \mu_a^*) \cap (\mu_{\min}^0 = \mu_{\min}^*)\}$, то $\{f \equiv \mu_{\max}, f^* = 0,$
 $v = 0, l = 0\}$, иначе $\{\mu_{\max} = \mu_{\max}^0 (1 - f^*/f^0)/(1 - f^*/f)\}$, $\alpha = \alpha^0 +$
 $+ \alpha^*/\mu_{\max}^* \cdot (\mu_{\max} - \mu_{\max}^0)\}$, если $\{(\mu_K/\mu_a^0 \neq n_2) \cap ((\mu_K/\mu_a^* \neq n_1) \cup$
 $\cup (\alpha^0 \geq 0) \cup (j \neq 0))\}$, то {если $\{\mu_{\max}^j = \tilde{\mu}_{\max}\}$, то $\{\mu_{\max} \equiv \mu_{\max}^j,$
 если $\{(\beta^* < 0) \cap (\mu_a^0 = \mu_a^*) \cap (\mu_{\min}^0 = \mu_{\min}^*)\}$, то $\{f \equiv \beta, f^* = \beta^*,$
 $f^0 = \beta^0, v = 0, l = 1\}$, иначе {если $\{(\mu_a^0 = \mu_a^*) \cap (\mu_{\min}^0 = \mu_{\min}^*)\}$,
 то $\{f \equiv \mu_{\max}, f^* = \tilde{\mu}_{\max}, f^0 = \mu_{\max}^j, v = 1, l = 1,$ если $\{\beta^* < 0\}$,
 то $\{\beta = \beta^* + (\beta^j - \beta^*)(1 - \tilde{\mu}_{\max}/\mu_{\max}^j)/(1 - \tilde{\mu}_{\max}/\mu_{\max})\}$,
 иначе $\{\mu_{\max} = \tilde{\mu}_{\max}/[1 - (1 - \tilde{\mu}_{\max}/\mu_{\max}^j)(1 - f^*/f)/(1 - f^*/f^0)]\}$,

² Напомним, что $\beta_0 \geq 0$.

если $\{(j=0) \cap (\alpha^0 \alpha^* < 0)\}$, то {если $\{\mu_{\max}^{\hat{0}} \neq \tilde{\mu}_{\max}\}$, то $\{\alpha = \tilde{\alpha} +$
 $+ (\alpha^0 - \tilde{\alpha})(\mu_{\max} - \tilde{\mu}_{\max})/(\mu_{\max}^0 - \tilde{\mu}_{\max})\}$, иначе {если $\{(\mu_{\max}^0 \neq \mu_{\max}^*) \cup$
 $\cup (\mu_{\min}^0 \neq \mu_{\min}^*)\}$, то $\{\alpha = \tilde{\alpha} + (\alpha^0 - \tilde{\alpha})(1 - f^*/f)/(1 - f^*/f^0)\}$,
 иначе {если $\{\beta^* < 0\}$, то $\{\alpha = \tilde{\alpha} + (\alpha^0 - \tilde{\alpha})(\beta - \beta^*)/(\beta^0 - \beta^*)\}$,
 иначе $\{f \equiv \alpha, f^* = \tilde{\alpha}, v = 0, l = 1\}$ }}}.

Условие D:

если $\{(j=0) \cap (\alpha^0 \tilde{\alpha} < 0)\}$, то {если $\{\alpha \alpha^0 \leq 0\}$, то $\{\mu_a^1 = \mu_a, \mu_{\min}^1 = \mu_{\min},$
 $\mu_{\max}^1 = \mu_{\max},$ если $\{\beta^* < 0\}$, то $\{\beta^1 = \beta\}$, если $\{\mu_{\kappa}/\mu_a^* = n_1\}$,
 то $\{\tilde{\mu}_{\max} = \mu_{\max}^*\}$, иначе {если $\{\mu_{\kappa}/\mu_c^* \neq n_2\}$, то {если $\{\alpha^0 > 0\}$,
 то $\{\tilde{\mu}_{\max} = \mu_{\max}^{**}\}$, иначе $\{\tilde{\mu}_{\max} = \mu_{\max}^*\}$ }}, $j = 1\}$.

В случае конденсации углерода ($\beta < 0$), что возможно лишь при $n_2 > n_1$, пренебрегая давлением паров С над конденсированной фазой, можно представить поток J как сумму потока $J' = J(1 - (n_2 - n_1)\mu_c/\mu_{\kappa}$, поступающего в газовую фазу, и потока сажи $J'' = J - J'$. Тогда масса вещества из потока $J' \mu_{\kappa} = \mu_{\kappa} - \mu_c(n_2 - n_1)$, где μ_c — молекулярная масса углерода, содержит в атомарном состоянии $n_1 = n_1$ атомов О, $n_2 = n_1$ атомов С, $n_3 = n_3$ атомов Н, $n_4 = n_4$ атомов N и $n_i = n_i$ ($i \geq 10$) атомов инертных газов.

Условие E:

если $\{(n_1 < n_2) \cap (\beta < 0)\}$, то {к условиям A — D далее не обращаться,
 положить $\mu_a^2 = \mu_a, \mu_{\min}^2 = \mu_{\min}, \mu_{\max}^2 = \mu_{\max}, \beta \equiv 0, \alpha \equiv \text{const}$,
 если $\{\mu_{\kappa}/\mu_a^* = n_2\}$, то {положить $\mu_a \equiv \mu_a^2, \mu_{\min} \equiv \mu_{\min}^2, \mu_{\max} \equiv \mu_{\max}^2,$
 $J = 0\}$, иначе {заменив в (7) μ_{κ} и n_2 на μ_{κ}' и n_2' соответственно,
 пересчитать величины $\mu_a^*, \mu_{\min}^*, \mu_{\max}^{**}$, если $\{\mu_a^2 = \mu_a^*\}$, то $\{\mu_a \equiv \mu_a^*\}$,
 иначе $\{f \equiv \mu_a, f^* = \mu_a^*, f^0 = \mu_a^2\}$, если $\{\mu_{\min}^2 = \mu_{\min}^*\}$, то $\{\mu_{\min} \equiv \mu_{\min}^*\}$,
 иначе {если $\{\mu_a^2 = \mu_a^*\}$, то $\{f \equiv \mu_{\min}, f^* = \mu_{\min}^*, f^0 = \mu_{\min}^2\}$,
 иначе $\{\mu_{\min} \equiv \mu_{\min}^*/[1 - (1 - \mu_{\min}^*/\mu_{\min}^2)(1 - \mu_a^*/\mu_a)/(1 - \mu_a^*/\mu_a^2)]\}$,
 если $\{\mu_{\max}^2 = \mu_{\max}^{**}\}$, то $\{\mu_{\max} \equiv \mu_{\max}^{**}\}$, иначе {если $\{(\mu_a^2 = \mu_a^*) \cap$
 $\cap (\mu_{\min}^2 = \mu_{\min}^*)\}$, то $\{f \equiv \mu_{\max}, f^* = \mu_{\max}^{**}, f^0 = \mu_{\max}^2\}$, иначе $\{\mu_{\max} \equiv$
 $\equiv \mu_{\max}^{**}/[1 - (1 - \mu_{\max}^{**}/\mu_{\max}^2)(1 - f^*/f)/(1 - f^*/f^0)]\}$, если $\{(\mu_a^2 = \mu_a^*) \cap$
 $\cap (\mu_{\min}^2 = \mu_{\min}^*) \cap (\mu_{\max}^2 = \mu_{\max}^{**})\}$, то {к (9) далее не обращаться},
 иначе $\{v = 1, l = 1, J$ в (9) заменить на $J'\}$ }}}.

Отметим, что столь громоздкие в общем виде условия $A-E$ значительно упрощаются для каждой конкретной гетерогенной смеси.

Для правильного вычисления тепловых эффектов необходимо согласовать начало отсчета внутренних энергий исходных газовой и конденсированной фаз и продуктов реакции. Термодинамические части уже согласованы, так как все они равны нулю при переходе к газовой фазе при нулевой температуре (переход конденсированной фазы в продукты реакции можно представить как испарение, охлаждение газовой фазы до нулевой температуры, реакцию при постоянной температуре и нагрев газовой фазы).

Для согласования химических частей внутренних энергий наиболее простым, по нашему мнению, является следующий способ: внутреннюю химическую энергию продуктов реакции следует отсчитывать от предельно диссоциированного состояния, т. е. в (2) положить $\mu' = \mu_{\min}$, а к химическим частям внутренней энергии конденсированной и исходной газовой фазы прибавить энергию диссоциации CO и N₂ пропорционально содержанию в них C и N, т. е.

$$U_K = U_{K(a)} + D_{CO} \cdot n_2 / \mu_K + D_{N_2} n_4 / 2\mu_K,$$

$$U_D^0 = U_{D(a)}^0 + D_{CO} m_2 / \mu^0 + D_{N_2} m_4 / 2\mu^0.$$

Здесь D_{CO} и D_{N_2} — энергии диссоциации молекул CO и N₂ на атомы соответственно.

Для проверки правильности расчета теплового эффекта при таком выборе U , U_K , U_D^0 «проведем» реакцию при нулевой температуре массы M_1 газовой фазы и массы M_2 газа с составом, соответствующим конденсированной фазе (M_1 и M_2 согласованы по условию $\beta \geq 0$). Переход в любое состояние S типа (6) можно представить как последовательные перемешивание, реакцию, переводящую смесь в предельно диссоциированное состояние S_{\min} , и переход из S_{\min} в S при постоянном атомарном составе.

Точное значение теплового эффекта:

$$Q = M_1 U_{D(a)}^0 + M_2 U_{K(a)} - (M_1 + M_2) U_{(a)} |_S.$$

В состоянии S_{\min} смесь массой $(M_1 + M_2)$ содержит $M_1 / \mu^0 \cdot m_2 + M_2 / \mu_K \cdot n_2$ молей CO, $M_1 / \mu^0 \cdot m_4 + M_2 / \mu_K \cdot n_4$ молей N₂ и атомы. Следовательно,

$$(M_1 + M_2) U_{(a)} |_{S_{\min}} = - (M_1 / \mu^0 \cdot m_2 + M_2 / \mu_K \cdot n_2) D_{CO} - \\ - (M_1 / \mu^0 \cdot m_4 + M_2 / \mu_K \cdot n_4) D_{N_2}.$$

Тогда

$$Q = M_1 U_D^0 + M_2 U_K - (M_1 + M_2) (U_{(a)} |_S - U_{(a)} |_{S_{\min}}).$$

Как показано в [6, 7], при постоянном атомарном составе с высокой точностью

$$U_{(a)} |_S - U_{(a)} |_{S_{\min}} = E (1/\mu - 1/\mu_{\min}),$$

поэтому

$$Q = M_1 U_D^0 + M_2 U_K - (M_1 + M_2) U |_S,$$

где U рассчитывается по формуле (2) с условием $\mu' = \mu_{\min}$, что и требовалось доказать.

При конденсации углерода к внутренней энергии сажи, отсчитанной от газовой фазы в атомарном состоянии при нулевой температуре, следует добавить величину D_{CO} / μ_C .

Таким образом, предлагаемое описание движения химически активной гетерогенной смеси, содержащей атомы O, C, H, N и инертных веществ, включает в себя, кроме уравнений неразрывности, движения и

первого начала термодинамики (учитывающих межфазные взаимодействия), дифференциальное уравнение (9) с условиями $A - E$ и (10), формулу (2) при $\mu' = \mu_{\min}$, и для систем с мгновенной реакцией (квазиравновесное течение) — алгебраическое уравнение (3), либо при конечной скорости реакций по окончании периода индукции — дифференциальное уравнение кинетики из [6] при постоянных E и K (или K_+ , A из [6]).

Модель может быть применена и в случае конденсации углерода при малом давлении паров C .

Поступила в редакцию 4/X 1982

ЛИТЕРАТУРА

1. С. А. Губин, А. А. Борисов и др. ФГВ, 1978, 14, 1.
2. С. А. Ждан. ФГВ, 1981, 17, 6.
3. А. В. Пинаев. ФГВ, 1978, 14, 1.
4. Ш. Эйдельман, А. Буркат. Ракетная техника и космонавтика, 1980, 18, 9.
5. В. А. Левин. Матер. 7-го Международного коллоквиума по газодинамике взрыва и реагирующих систем. Минск, 1980 г.
6. Ю. А. Николаев. ФГВ, 1978, 14, 4.
7. Ю. А. Николаев, П. А. Фомин. 1982, 18, 1.
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика. М.: Наука, 1964.

ПАРАМЕТРЫ ИСТОЧНИКА И ЭФФЕКТИВНОСТЬ ВЗРЫВА В ГРУНТЕ

В. М. Кузнецов, А. Ф. Шацукевич
(Москва)

Под эффективностью взрыва в грунте будем понимать отношение вытесненного или выброшенного объема среды к энергии взрыва. Определенное таким образом понятие эффективности соответствует так называемому фугасному действию взрыва и традиционным способам испытания взрывчатых веществ на работоспособность по методам свинцовой бомбы (проба Трауцля) и воронкообразования [1—3]. При взрывах, используемых для дробления скальных грунтов, понятие «эффективность» более широко: оно включает в себя не только относительный объем отбитой породы, но и ее качество, т. е. относительное количество фракций нужного размера.

Многолетняя практика взрывных работ показывает, что при равных физико-механических свойствах твердой среды (прочность, трещиноватость, блочность и т. п.) степень дробления горной породы тем выше, чем больше работоспособность ВВ. Коэффициент полезного действия взрыва в грунтах очень мал и по различным данным составляет 1—10%. Большинство исследователей полагают, что потери энергии при взрыве связаны с диссипативными процессами, происходящими при деформировании и разрушении среды, пренебрегая при этом возможностью прямого тепло- и массообмена между продуктами детонации и окружающей средой. Как показывают оценки [4], такое пренебрежение можно делать, если рассматривать диффузионный теплообмен на гладкой непроницаемой границе взрывной полости. Однако ситуация резко изменяется, если исследовать конвективный механизм тепло- и массообмена [5, 6]. Вообще говоря, возможность такого механизма предсказана в работе [1]: «Интенсивный теплообмен с окружающей средой может иметь место в тех случаях, когда происходит весьма сильное дробление среды, прилегающей к очагу взрыва...; получившаяся в результате этого дробления пыль, смешиваясь с продуктами детонации, может отнять у них значительное количество тепла еще в процессе расширения». Иными словами, в этом случае процесс расширения газообразных продуктов детонации взрыва должен быть неадиабатическим. Очевидно, что теплообмен, если таковой влияет на расширение продуктов детонации (ПД), должен существенно