

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В ГЕТЕРОГЕННОЙ СРЕДЕ С ХИМИЧЕСКИМИ ПРЕВРАЩЕНИЯМИ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

*Е.С. Шестаковская*

В рамках модифицированной математической модели «замороженной» газовзвеси, инвариантной относительно преобразования Галилея, проведен анализ влияния химического превращения в газовой фазе на процесс распространения ударной волны в гетерогенной смеси. Было показано, что ударная волна способна увеличить скорость химических реакций в газовой фазе, а реакция окисления приводит к ускоренному подъему температуры и давления в газовой фазе и способствует увеличению скорости распространения ударной волны в гетерогенной среде. Возможна реализация ситуации, когда потери импульса и энергии газовой фазы за счет взаимодействия с конденсированной фазой полностью компенсируются выделением энергии в газовой фазе за счет химических превращений. Этот факт необходимо учитывать при планировании мероприятий, связанных с предотвращением техногенных катастроф.

*Ключевые слова:* гетерогенная среда; фаза; ударная волна.

## Введение

Исследование процесса распространения ударных волн (УВ) в двухфазной гетерогенной среде имеет большое практическое значение, в частности, для разработки методов обеспечения работ в шахтах, тушения лестных пожаров и т.д.. Согласно [1, 2] лесной пожар представляет собой многостадийное явление, включающее в себя процессы прогрева лесного горючего материала (ЛГМ), их сушку и пиролиз с последующим горением газообразных и конденсированных продуктов пиролиза. На стадии пиролиза в газовую фазу поступают горючие газообразные вещества (угарный газ, метан), что обеспечивает возможность протекания в газовой фазе химических реакций окисления. Подрыв шнурового заряда взрывчатого вещества (ВВ) в определенном участке фронта пожара приводит к «выжиганию» продуктов пиролиза и прекращению распространения пожара [2].

Целью настоящей работы является математическое моделирование распространения цилиндрически расходящейся УВ в двухфазной гетерогенной среде с химически активной газовой фазой.

## Постановка задачи

Следуя [3], запишем систему уравнений модифицированной модели «замороженной» газовзвеси в переменных Лагранжа в виде

$$\frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{dt} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (1)$$

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_j A_i^{(j)} g^{(j)}, \quad (2)$$

$$\rho \frac{du}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + f_x, \quad \rho \frac{dv}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + f_y, \quad (3)$$

$$\frac{dx}{dt} = u, \quad \frac{dy}{dt} = v, \quad (4)$$

$$\frac{dE}{dt} = -p \frac{d\sigma}{dt} + \sigma \sum_j (\Delta E^{(j)} g^{(j)}), \quad (5)$$

$$E = RT \sum_i \left( \frac{c_i \sigma_i}{\mu_i} \right), \quad p = (\gamma_{eff} - 1) \rho E, \quad c_i = \frac{\mu_i n_i}{\rho}, \quad (6)$$

$$\gamma_{eff} = 1 + \left[ \sum_i \left( \frac{c_i}{\mu_i} \right) \right] \left[ \sum_i \left( \frac{c_i \delta_i}{\mu_i} \right) \right]^{-1}. \quad (7)$$

Здесь  $\rho$  – массовая плотность газовой смеси;  $p$  – давление смеси;  $u, v$  –  $x$  и  $y$  компоненты скорости смеси;  $\sigma = 1/\rho$  – удельный объем;  $n_i$  – молярно-объемная концентрация  $i$ -й компоненты смеси (моль/м<sup>3</sup>);  $A_i^{(j)}$  – стехиометрический коэффициент компонента смеси, где номер химической реакции указан верхним индексом в скобках, а номер компонента смеси нижним индексом;  $g^{(j)}$  – скорость протекания  $j$ -й реакции (моль/(м<sup>3</sup>с));  $E$  – удельная внутренняя энергия смеси, с учетом полного тепловыделения (поглощения) за счет химических превращений;  $c_i$  – массовая концентрация  $i$ -й компоненты смеси (доля массы  $i$ -й компоненты в полной массе смеси малого элемента объема);  $\mu_i$  – молярная масса компонента (кг/моль);  $R = 8,144$  Дж/(К·моль) – универсальная газовая постоянная; коэффициент  $\delta_i = 3/2$  – для одноатомного газа,  $\delta_i = 5/2$  – для двухатомного,  $\delta_i = 6/2$  – для трехатомного.  $\Delta E^{(j)}$  – энергетический выход реакции (Дж/моль).

Суммирование в (2) и (5) производится по всем учитываемым химическим реакциям. В уравнении (7) суммирование производится по всем компонентам смеси. Уравнения для скоростей химических реакций  $g_i$  записываются для каждого конкретного рассматриваемого случая. Так, при рассмотрении реакции окисления окиси углерода мы будем использовать

$$g^{(2CO+O_2 \rightarrow 2CO_2)} = 7 \cdot 10^{11} n_{CO} \exp(-96370/RT). \quad (8)$$

Система уравнений (1) – (8) совместно с уравнениями для скоростей рассматриваемых химических реакций представляет собой математическую модель процесса распространения ударной волны по двухфазной среде (газ – конденсированная фаза) с химически активной газовой фазой.

## Метод решения и результаты расчетов

При численном решении системы уравнений (1) – (8) целесообразно использовать метод разделения по физическим процессам. На первом этапе рассматривается химически замороженная смесь, и система уравнений решается методом, подробно представленным в работе [4], а на втором этапе решаются уравнения химической кинетики по неявной схеме.

В проведенном нами численном моделировании рассматривался объем среды с начальным давлением  $P_0 = 1$  атм и плотностью  $\rho_0 = 1,29$  кг/м<sup>3</sup>, в котором в начальный момент времени на расстоянии 1 м от земли расположена цилиндрическая область повышенного давления  $P_1$  и плотности  $\rho_1$  радиусом 0,1 м. Область повышенного давления создается продуктами взрыва цилиндрического заряда с уравнением состояния (5), начальной плотностью  $\rho_1 = 1052$  кг/м<sup>2</sup> и теплотой сгорания  $Q = 5447$  кДж/м<sup>3</sup>.

Газовая смесь включала четыре компонента:  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $CO$  и  $CO_2$ . Как показано в работах [1, 2], учет этих четырех компонентов позволяет адекватно описывать распространение УВ в лесу при наличии пожара. Проводился учет химической реакции окисления окиси углерода. В области повышенного давления, имитирующей продукты взрыва, брались следующие начальные концентрации компонентов смеси  $C_{N_2} = 0,78$ ,  $C_{O_2} = 0,21$ ,  $C_{CO} = 0$  и  $C_{CO_2} = 0,01$ . Начальная концентрация компонентов в области нормального давления (окружающая среда) определялась рассматриваемой задачей. Наличие конденсированной фазы учитывалось через силу межфазного взаимодействия  $f$ . При фиксированном диаметре частиц  $d = 0,1$  мм параметром, определяющим характеристики конденсированной фазы, служила объемная концентрация частиц  $\alpha$ .

Рассматривались две различные ситуации:

1) распространение ударной волны в химически инертной газовой фазе без конденсированной фазы  $\alpha = 0$  и без учета химических реакций – концентрации веществ в окружающей среде  $C_{N_2} = 0,78$ ,  $C_{O_2} = 0,21$ ,  $C_{CO} = 0$  и  $C_{CO_2} = 0,01$  – такие же, как и в области продуктов взрыва;

2) распространение ударной волны в химически активной газовой смеси при наличии конденсированной фазы  $\alpha = 0,001$ , с учетом химических реакций – концентрации веществ в окружающей среде  $C_{N_2} = 0,725$ ,  $C_{O_2} = 0,205$ ,  $C_{CO} = 0,06$  и  $C_{CO_2} = 0,01$  – содержит окись углерода.

В ходе расчетов контролировалось выполнение закона сохранения энергии. Так, в отсутствии химических превращений полная энергия системы сохранялась в ходе расчетов с точностью не хуже 0,3%. При наличии химических реакций полная энергия системы увеличивалась за счет энерговыделения в ходе реакций. При наличии в системе частиц конденсированной фазы полная энергия газовой фазы уменьшалась, даже при наличии реакций, за счет работы против сил сопротивления.

На рис. 1, 2 приведено поле давления для этих двух случаев в различные моменты времени (0,65 мс и 1,5 мс). Сравнение результатов показывает, что интенсивность УВ увеличивается из-за протекания химической реакции, как при отсутствии частиц конденсированной фазы, так и при их наличии. Аналогичное поведение – усиление УВ при взрыве заряда в горящем лесу – наблюдается и в эксперименте [1]. Однако наличие частиц конденсированной фазы даже в столь малой объемной концентрации ( $\alpha = 0,001$ ) оказывает на динамику распространения УВ влияние не меньшее, чем учет химических реакций.

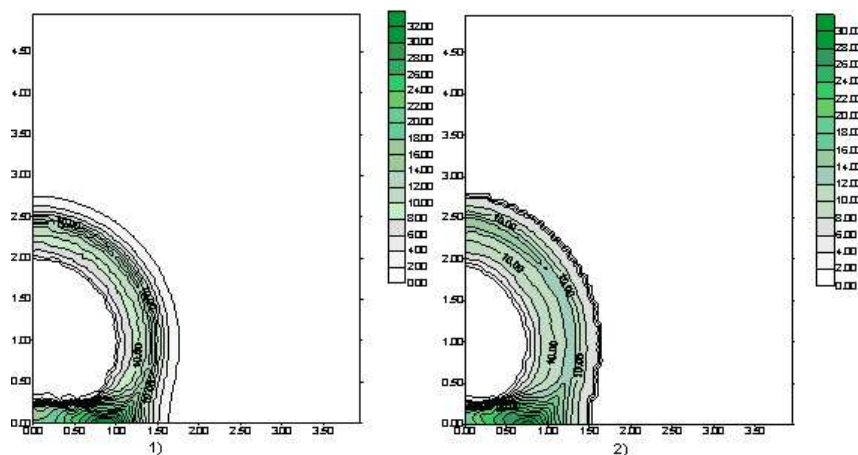


Рис. 1. Поле давления в момент времени  $t = 0,65$  мс: 1) в инертном газе; 2) в газовой смеси с частицами и с химическими превращениями

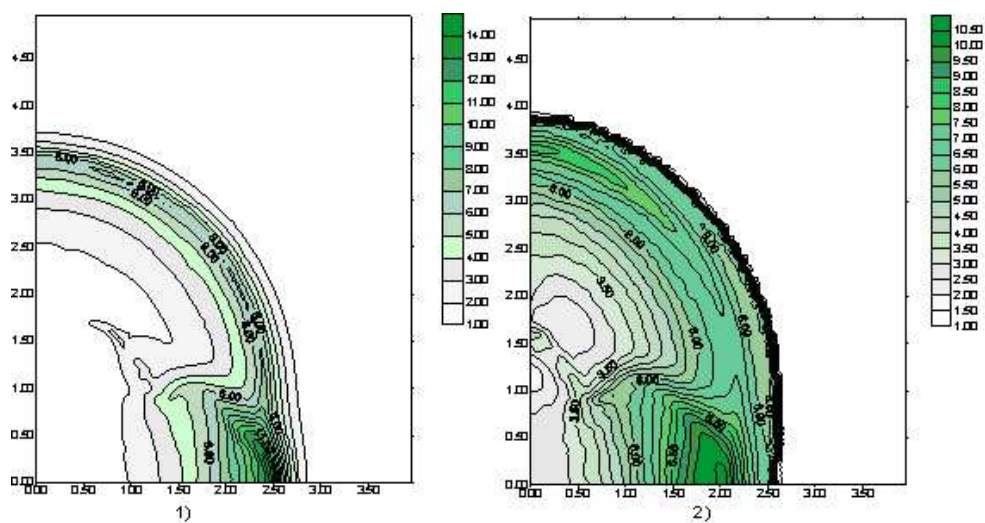


Рис. 2. Поле давления в момент времени  $t = 1,5$  мс: 1) в инертном газе; 2) в газовой смеси с частицами и с химическими превращениями

## Заключение

В результате проведения сравнительного численного исследования влияния химических реакций и сопротивления со стороны частиц конденсированной фазы на динамику распространения цилиндрически расходящейся ударной волны были получены следующие результаты:

1. Предложена численная схема для описания динамики двухфазной гетерогенной среды с химически активной газовой фазой.
2. Показано, что протекание в газовой смеси химических реакций приводит к повышению энергии системы и интенсивности распространяющейся по смеси УВ, что соответствует экспериментальным результатам [1].

## Литература

1. Гришин, А.М. Экспериментальное исследование воздействия взрыва конденсированных ВВ на фронт верхового лесного пожара / А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев // ДАН СССР. – 1989. – Т. 308, № 5. – С. 1074–1078.
2. Гришин, А.М. Экспериментальное и теоретическое исследование взаимодействия взрыва на фронт верхового лесного пожара / А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев // Физика горения и взрыва. – 1989. – Т. 25, № 6. – С. 72–79.
3. Ковалев Ю.М. Анализ инвариантности относительно преобразования Галилея некоторых моделей математических многокомпонентных сред / Ю.М. Ковалев, В.Ф. Куропатенко // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2012. – № 27 (286), вып. 13. – С. 69–73.
4. Ковалев Ю.М. Численное исследование распространения цилиндрических ударных волн в гетерогенных средах / Ю.М. Ковалев, Е.С. Шестаковская // Вестник ЮУрГУ. Серия: Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника. – 2013. – Т. 13, № 3. – С. 102–108.

5. Ковалев, Ю.М. Уравнение состояния и температуры ударного сжатия кристаллических ВВ / Ю.М. Ковалев // Физика горения и взрыва. – 1984. – Т. 20, № 2. – С. 102–107.

Елена Сергеевна Шестаковская, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра «Вычислительная механика сплошных сред», Южно-Уральский государственный университет (г. Челябинск, Российская Федерация), leshest@list.ru.

---

**Bulletin of the South Ural State University.**  
**Series «Mathematical Modelling, Programming & Computer Software»,**  
**2013, vol. 6, no. 4, pp. 128–133.**

---

MSC 35Q35

## Mathematical Modelling of Shock Wave Propagation in Heterogeneous Media with Chemical Transformations in the Gas Phase

*E.S. Shestakovskaya*, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, leshest@list.ru

In the framework of the modified mathematical model of «frozen» gas suspension that is invariant under Galilean transformation, the analysis of the influence of chemical reaction in the gas phase to the propagation of shock waves in a heterogeneous mixture is performed. It is shown that the shock wave can increase the rate of chemical reactions in the gas phase and the oxidation reaction results in an accelerated rise in temperature and pressure in the gas phase and increases the propagation velocity of the shock wave in a heterogeneous environment. Possible implementation situation where the loss of momentum and energy of the gas phase through the interaction with the condensed phase is fully compensated in the release of energy due to the gas phase chemical reactions, is possible. This fact must be taken into account when planning activities related to the prevention of technological disasters.

*Keywords: heterogeneous medium; the phase; the shock wave.*

## References

1. Grishin A.M., Kovalev Yu.M. Experimental Investigation the Impact of the Explosion of Condensed Explosives on the Front Crown Forest Fire [Eksperimentalnoye issledovaniye vozdeystviya vzryva kondensirovannykh VV na front verkhovogo lesnogo pozhara]. *Doklady akademii nauk* [Academy of Sciences of the USSR Doklads], 1989, vol. 308, no. 5, pp. 1074–1078.
2. Grishin A.M., Kovalev Yu.M. Experimental and Theoretical Investigation of the Interaction of the Explosion on the Front Crown Forest Fire [Eksperimentalnoye i teoreticheskoye issledovaniye vzaimodeystviya vzryva na front verkhovogo lesnogo pozhara]. *Fizika goreniiya i vzryva* [J. The Physics of Combustion and Explosion], 1989, vol. 25, no. 6, pp. 72–79.
3. Kovalev Yu.M., Kuropatenko V.F. Analysis of the Invariance under the Galilean Transformation of Some Mathematical Models of Multi-media [Analiz invariantnosti otnositelno preobrazovaniya Galileya nekotorykh modeley matematicheskikh mnogokomponentnykh sred]. *Bulletin of the South Ural State University. Series «Mathematical modeling. Programming & Computer Software»*, 2012, no. 27 (286), issue 13, pp. 69–73.

4. Kovalev Yu.M., Shestakovskaya E.S. Numerical Analysis of Cylindrical Shock Waves in Heterogeneous Environments [Chislennoye issledovaniye rasprostraneniya tsilindricheskikh udarnykh voln v geterogennykh sredakh]. *Bulletin of the South Ural State University. Series «Computer Technologies, Automatic Control, Radio Electronics»*, 2013, vol. 13, no. 3, pp. 102–108.
5. Kovalev Yu.M. The Equation of State and the Temperature of the Shock Compression of Crystalline Explosives [Uravneniye sostoyaniya i temperatury udarnogo szhatiya kristallicheskikh vzryvchatykh veshchestv]. *Fizika goreniya i vzryva* [J. The Physics of Combustion and Explosion], 1984, vol. 20, no. 2, pp. 102–107.

*Поступила в редакцию 3 сентября 2013 г.*