

ПРИБЛИЖЕННЫЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ СОСТАВА ХИМИЧЕСКИ РЕАГИРУЮЩИХ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ ПРОДУКТОВ ДЕТОНАЦИИ*

В. А. Шаргатов¹, С. А. Губин², А. В. Кривошеев³

Аннотация: Приближенный метод для расчета состава и параметров смеси продуктов детонации разработан на основе предположения о существовании частичного химического равновесия. Для расчета состава и термодинамических параметров используется условие существования экстремума свободной энергии Гельмгольца при заданной плотности, температуре и молекулярном весе смеси. В результате жесткую систему дифференциальных уравнений детального кинетического механизма удается на стадии энергосвыделения заменить одним дифференциальным уравнением и системой алгебраических уравнений без существенной потери в точности решения. Этот способ всегда согласован с детальным механизмом и может использоваться как отдельно, так и совместно с решением жесткой системы, заменяя его на стадии, когда бимолекулярные реакции находятся в состоянии, близком к равновесию.

Ключевые слова: продукты детонации; кинетический механизм; химическое равновесие; бимолекулярные реакции

Литература

1. *Borisov A. A., Gubin S. A., Shargatov V. A.* Applicability of a chemical-equilibrium model to explosion products // *Dynamics of detonations and explosions: Explosion phenomena* / Eds. A. L. Kuhl, J.-C. Leyer, A. A. Borisov, W. A. Sirignano. — Progress in astronautics and aeronautics ser. — AIAA, 1991. Vol. 134. No. 1. P. 138–153.
2. *Брякина У. Ф., Губин С. А., Тереза А. М., Шаргатов В. А.* Определение границы применимости модели химически равновесной смеси к продуктам детонации газовых смесей // *Хим. физика*, 2010. Т. 29. № 12. С. 24–31.
3. *Брякина У. Ф., Губина Т. В., Шаргатов В. А.* Достаточное условие применимости модели химически равновесной смеси для описания состояния продуктов взрыва // *Хим. физика*, 2011. Т. 30. № 6. С. 40–48.
4. *Брякина У. Ф., Губин С. А., Шаргатов В. А., Любимов А. В.* Исследование изменения состава продуктов при детонации свободного объема горючей смеси // *Хим. физика*, 2012. Т. 31. № 3. С. 16.

* Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 14-03-00420 А).

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», shargatov@mail.ru

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», sagubin@mephi.ru

³Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», krivosheevav1@gmail.com

5. Губин С. А., Шаргатов В. А. Численное моделирование изменения состава продуктов детонации свободного объема горючей смеси // ФГВ, 2012. Т. 48. № 3. С. 46–52.
6. Губин С. А., Шаргатов В. А. Эффективный приближенный метод решения задачи об установлении химического равновесия в продуктах взрыва газовых смесей // Хим. физика, 2013. Т. 32. № 4. С. 80–86.
7. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание: В 4 т. / Под ред. В. П. Глушко, Л. В. Гуревича, Г. А. Бермана и др. — М.: Наука, 1979. Т. 1. Кн. 2. 344 с.
8. *Aslam T. D., Powers J. M.* High accuracy shock-fitted computation of unsteady detonation with detailed kinetics // 10th U.S. National Congress on Computational Mechanics Proceedings. Columbus, Ohio, 2009.

Поступила в редакцию 01.11.14