

На правах рукописи



Фомин Павел Аркадьевич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗРЫВНЫХ И ДЕТОНАЦИОННЫХ ТЕЧЕНИЙ В
МНОГОФАЗНЫХ СРЕДАХ С ХИМИЧЕСКИМИ РЕАКЦИЯМИ**

01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Новосибирск 2020

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского Отделения Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

Крайнов Алексей Юрьевич, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», заведующий кафедрой.

Марков Владимир Васильевич, доктор физико-математических наук, ФГБУН Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук, ведущий научный сотрудник.

Луценко Николай Анатольевич, доктор физико-математических наук, доцент, ФГБУН Институт автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения Российской академии наук, ведущий научный сотрудник.

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской Академии Наук, г. Москва.

Защита состоится 4 марта 2020 года в 9 часов 30 минут на заседании Диссертационного совета Д 003.053.01 по защите диссертаций на соискание ученой степени доктора наук в ФГБУН Институте теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН по адресу: 630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГБУН Института теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, <http://www.itp.nsc.ru>

Отзыв на автореферат в двух экземплярах, заверенных печатью учреждения, просьба направлять на имя ученого секретаря диссертационного совета Д 003.053.01 по адресу: 630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 1 (факс: (383)330-84-80, e-mail: dissovet@itp.nsc.ru).

Автореферат разослан « ____ » _____ 2020 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
д.ф.-м.н., профессор



Владимир Васильевич Кузнецов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Совершенствование методов предотвращения и минимизации последствий взрыва и детонации облаков, образующихся при техногенных утечках жидких и газообразных горючих, повышение взрывобезопасности угольных шахт и технических устройств (например, газожидкостных химических реакторов), развитие технологии использования высокоскоростных высокотемпературных импульсных газовых потоков (например, в установках по детонационно-газовому нанесению порошковых покрытий), повышение удельных энергетических характеристик ракетных и авиационных двигателей - невозможно без исследования взрывных и детонационных процессов в газовых, газожидкостных и газопылевых системах.

Использование детальных кинетических схем для описания детонационного сгорания газообразных углеводородов неудобно своей громоздкостью, наличием большого числа констант, огромным объемом численных вычислений. Это не позволяет использовать детальные кинетические схемы в численных расчетах многофронтной структуры детонационных волн (ДВ). Расчет химического равновесия в газовой смеси принципиальных сложностей не представляет. Однако использование соответствующей системы нелинейных алгебраических уравнений в рамках аналитического анализа и численных расчетах сложных взрывных и детонационных течений затруднительно. Поэтому большое распространение при моделировании детонационных течений получили обобщенные модели химической кинетики и химического равновесия. Они позволяют без расчета детального химического состава вычислять молярную массу и внутреннюю энергию газовой смеси, и тем самым существенно упрощают описание химических превращений.

Существовавшие обобщенные модели детонационной химической кинетики и химического равновесия в газовых смесях обладали рядом принципиальных недостатков: низкой точностью, сложностями в выборе констант, несоответствием принципу Ле Шателье и второму началу термодинамики. Обобщенные модели химического равновесия в газовой фазе газожидкостных смесей при наличии межфазного массообмена разработаны не были. Отсутствовали и обобщенные модели химической кинетики детонационного сгорания монотоплив и газовых смесей двух и более горючих.

Теория детонации газожидкостных систем была далека от своего завершения, например, в части учета влияния химических превращений, осложненных межфазным массообменом, на параметры волны.

Инициирование взрыва преломленными в газ ударными волнами (УВ), как один из возможных механизмов распространения ДВ по пузырьковой смеси, не учитывалось. Возможность распространения пузырьковой детонации со сверхзвуковой (относительно замороженной по физическим процессам

скоростью звука) скоростью не рассматривалась. Вопрос о принципиальной возможности многократного прохождения ДВ по пузырьковой смеси оставался открытым.

Важный класс эффектов, который находился за рамками анализа взрывобезопасности газовых и пузырьковых смесей - конденсация паров горючего при адиабатическом сжатии и нагреве газа за фронтом УВ и в пузырьке, сжимаемом УВ, распространяющейся по жидкости.

Принципиальный вопрос о влиянии теплофизических свойств частиц на эффективность подавления газовой детонации химически инертными частицами не рассматривался.

Таким образом, имелась совокупность взаимосвязанных задач, связанных с описанием химических превращений и моделированием взрывных и детонационных течений в газовых, газожидкостных и газопылевых смесях, решение которых является необходимым и логичным шагом на пути построения теории взрыва и детонации рассматриваемых систем, использования данных процессов в технических устройствах и технологических процессах и решения проблем взрывобезопасности.

Цель работы состояла в решении двух взаимосвязанных проблем:

- создании комплекса обобщенных моделей химической кинетики и химического равновесия для описания химических превращений в газовых смесях, а также газофазных реакций в газожидкостных и газопылевых смесях при взрывных и детонационных процессах, в том числе при наличии межфазного тепло- и массообмена и
- теоретическом моделировании взрывных и детонационных процессов в указанных смесях с учетом адекватного реальности описания межфазных взаимодействий и химических превращений по предложенным моделям химической кинетики и химического равновесия.

Моделирование взрывных и детонационных процессов предполагало разработку физико-математических моделей, исследование механизмов рассматриваемых явлений, расчет области существования взрыва и детонации, параметров и структуры ДВ, решение вопросов взрывобезопасности, определение возможности технического использования рассматриваемых процессов.

Для достижения поставленной цели решались следующие **основные задачи**:

- Разработка обобщенных моделей химического равновесия в газовых, газожидкостных и газопылевых смесях. Оценка времени восстановления химического равновесия в газах.
- Создание обобщенных моделей химической кинетики детонационного сгорания однотопливных и многотопливных газовых смесей и бинарных газовых смесей, содержащих монотопливо.

- Разработка моделей детонации в газокапельных и газопленочных смесях и расчет параметров и структуры соответствующих ДВ.
- Анализ результатов высокоскоростной видеосъемки инициирования взрыва пузырьков в пузырьковом кластере при его нагружении УВ. Исследование возможности возбуждения взрыва предварительно поджатых пузырьков преломленными УВ.
- Разработка модели ударно-волновой динамики и взрыва одиночных пузырьков и развитие моделей пузырьковой детонации в части описания химических превращений при наличии межфазного массообмена. Проведение соответствующих расчетов.
- Поиск начальных параметров пузырьковых систем, при которых могут реализовываться детонационные структуры со скачкообразным ростом давления на переднем фронте.
- Качественное рассмотрение периодически повторяющихся взрывных и детонационных процессов в пузырьковых средах на основе жидких монотоплив.
- Разработка моделей ударной волны в газовой смеси и ударно-волнового сжатия пузырька с учетом принципиальной возможности конденсации паров тяжелого углеводородного горючего. Проведение соответствующих расчетов без и при наличии конденсации, определение условий, при которых конденсация возможна. Анализ влияния конденсации на взрывоопасность газовых и пузырьковых систем. Оценка характерного времени конденсации.
- Моделирование подавления газовой детонации облаком химически инертных частиц. Разработка алгоритма расчета минимальной концентрации твердой фазы, обеспечивающей подавление волны. Анализ влияния термодинамических параметров твердой фазы на эффективность подавления.

Научная новизна. Впервые предложены обобщенные двустадийные модели химической кинетики детонационного сгорания углеводородо-воздушных смесей, в которых химические превращения в зоне индукции заменяются брутто-реакцией разложения углеводородов.

Впервые сформулирована обобщенная модель химического равновесия в углеводородо-воздушных газовых смесях, позволяющая рассчитывать термодинамические параметры смесей по явным алгебраическим формулам в зависимости от давления и температуры.

Впервые разработан комплекс обобщенных моделей химической кинетики детонационного сгорания газовых смесей и химического равновесия в газовых, газожидкостных и газопылевых смесях, который обладает следующим оригинальным набором свойств: физической обоснованностью, простотой, высокой точностью, соответствием второму началу термодинамики и принципу Ле Шателье, применимостью в широком диапазоне начальных химических составов.

Впервые получена аналитическая формула для оценки времени восстановления химического равновесия в углеводородо-кислородных газовых смесях.

Предложена обобщенная модель химического равновесия в газожидкостной двухфазной смеси, позволяющая впервые учесть изменение термодинамических параметров газовой фазы, обусловленное межфазным массообменом.

Впервые сформулированы обобщенные модели химической кинетики для описания детонационного сгорания многотопливных газовых смесей, в том числе бинарной смеси, содержащей монотопливо.

Впервые разработана модель стационарной детонации в газокапельной смеси, построенная без привлечения искусственных предположений о характере потока в плоскости Чепмена-Жуге и учитывающая сильное непостоянство молярной массы газа и теплового эффекта вследствие химической реакции, динамики двухфазного потока и межфазного тепло- и массообмена.

Впервые предложена модель стационарной детонации в системе пленка жидкости – газ с учетом наличия сажи в продуктах реакции и переменности термодинамических параметров газа и тепловыделения химической реакции по сечению трубы.

Обнаружен эффект инициирования взрыва сжатых в первичной ударной волне химически активных пузырьков преломленными в них вторичными ударными волнами, порожденными взрывами соседних пузырьков.

Впервые предложено описание взрыва и детонации пузырьковых систем с учетом совместного влияния химической реакции, динамики среды и межфазного тепло- и массообмена на термодинамические параметры газовой фазы и тепловыделение. Это позволило выполнить расчеты взрывных и детонационных процессов в пузырьковых системах, в которых горючее и окислитель изначально находятся в разных фазах, в гибридных пузырьковых системах и в пузырьковых системах на основе жидкого монотоплива.

Предсказано существование неизвестных ранее волн пузырьковой детонации, распространяющихся со сверхзвуковой (относительно замороженной по физическим процессам скорости звука) скоростью, и в которых имеет место скачкообразный рост давления на переднем ударном фронте волны.

Предложен новый способ измерения взрывных характеристик газовой смеси при повышенных давлениях и температурах, основанный на использовании взрыва одиночного пузырька за фронтом ударной волны, распространяющейся по жидкости.

Впервые предложена концепция источника мощных периодических акустических сигналов в жидкости (акустического “лазера”) на основе

многократного прохождения детонационной волны по пузырьковой смеси на основе жидкого монотоплива.

Для конкретной газовой смеси предсказана возможность конденсации паров тяжелого углеводородного горючего при ее сжатии и нагреве в ударной волне и показано ее влияние на химический состав газа и его взрывобезопасность. Это впервые позволило показать, что сильно переобогащенные парами, и потому изначально негорючие смеси, могут, тем не менее, взрываться в ударной волне, если конденсация сместит состав смеси в область воспламенения.

Предсказана возможность конденсации паров тяжелого углеводородного горючего при адиабатическом сжатии и нагреве газа в пузырьке за фронтом ударной волны, распространяющейся по жидкости. Показано, что данный эффект может служить причиной ударно-волнового инициирования взрыва сильно переобогащенных парами (и потому изначально негорючих) пузырьков, если конденсация сместит состав смеси в область воспламенения.

Впервые предложен алгоритм расчета минимальной концентрации химически инертных микрочастиц, обеспечивающей подавление газовой детонации, основанный на соотношении между размером детонационной ячейки и диаметром канала. Впервые показано влияние термодинамических параметров химически инертных микрочастиц на ослабление и подавление волны.

Научная и практическая ценность. Предложенные модели химического равновесия и химической кинетики позволяют просто, и вместе с тем с высокой точностью, описывать химические превращения при моделировании взрывных и детонационных процессов в газовых, газожидкостных и газопылевых системах, в том числе при наличии межфазного тепло- и массообмена. Они уже использованы как автором диссертации, так и другими исследователями для решения широкого круга научных задач, например, при моделировании газочапельной, газопленочной и пузырьковой детонации, взрывных процессов в пузырьковых средах.

Проведенное моделирование взрыва и детонации в газовых и газожидкостных смесях позволило ввести в научный оборот новые эффекты и явления. Сверхзвуковые (по “замороженной” скорости звука) волны пузырьковой детонации, инициирование взрыва пузырьков преломленными УВ, конденсацию паров горючего за фронтом УВ, распространяющейся по газовой смеси, и в сжимаемом УВ пузырьке, многократное прохождение ДВ по пузырьковой смеси. Появилась возможность моделировать взрывные и детонационные процессы в пузырьковых системах, в которых горючее и окислитель находятся в разных фазах, в гибридных системах и в системах на основе жидких монотоплив.

Результаты работы могут быть использованы для решения вопросов обеспечения пожаро-, взрыво- и детонационной безопасности газовых и

газожидкостных систем (например, химических реакторов) и угольных шахт. Они могут использоваться и при разработке технических устройств, использующих детонацию и взрыв. Например, предложенные модели кинетики и химического равновесия уже использованы при разработке технологии детонационно-газового нанесения порошковых покрытий, термогазодетонационного удаления заусенцев и моделировании работы ракетных двигателей, основанных на детонационном сгорании топлива.

Достоверность полученных результатов. Достоверность предложенного описания химических превращений подтверждена анализом справедливости использованных предположений и успешной практикой использования соответствующих моделей в расчетах взрыва и детонации в газовых, газожидкостных (газокапельных, пузырьковых) и газопылевых смесях.

Достоверность моделей газокапельной и газопленочной детонации, взрывных и детонационных процессов в пузырьковых средах и подавления газовой детонации частицами, подтверждена соответствием результатов расчетов эксперименту и анализом справедливости использованных при их разработке предположений.

Достоверность принципиальной возможности конденсации паров за ударной волной в газовой смеси и при ударно-волновом сжатии пузырька, а также влияния данного эффекта на взрывобезопасность газовых и пузырьковых систем, обусловлена использованием общепринятых и надежных физических подходов для описания конденсационного процесса, динамики сплошной среды и воспламенения. Сделанные оценки характерного времени конденсации служат дополнительным подтверждением достоверности рассматриваемого процесса.

Личный вклад автора. В диссертации представлены результаты, в основном принадлежащие автору лично. На результаты, полученные в соавторстве, есть указание в соответствующих частях текста.

Моделирование кинетики детонационного сгорания газовых смесей и детонации в системе газ-пленка сделаны соискателем лично.

Модели химического равновесия в газовых и гетерогенных смесях и модель газокапельной детонации разработаны П.А. Фоминым в соавторстве (соискателю принадлежит участие в постановке всех задач, вывод всех формул и математические расчеты).

Лично соискателю принадлежат: модель ударно-волновой динамики и взрыва пузырьков в углеводородо-кислородных системах с предварительно перемешанными фазами и гибридных пузырьковых системах, обнаружение инициирования пузырьков преломленными ударными волнами, предсказание (и расчет областей существования) сверхзвуковых (по замороженной скорости звука) детонационных режимов, концепция многократных взрывных процессов в пузырьках и акустического “лазера” на основе пузырьковых систем с монотопливом в качестве жидкой компоненты.

Расчет динамики и взрыва пузырьков в водородо-кислородных пузырьковых смесях и параметров, структуры и пределов волны пузырьковой детонации выполнен П.А. Фоминым в соавторстве (соискателю принадлежал алгоритм описания химических превращений, в том числе при наличии межфазного массообмена).

Исследование конденсационных процессов при ударно-волновом нагружении газовых и пузырьковых систем и моделирование подавления волны газовой детонации инертными частицами выполнены П.А. Фоминым лично.

Основные положения, выносимые на защиту. Автор защищает:

Модели химического равновесия: в газовых смесях; в газожидкостных смесях при наличии межфазного массообмена; в газопылевых смесях с химически инертной твердой компонентой.

Модели химической кинетики детонационного сгорания: однотопливных газовых смесей; водородо-кислородных газовых смесей с добавками монотоплив; многотопливных газовых смесей.

Формулу для оценки характерного времени восстановления химического равновесия в газовых смесях.

Модели стационарной гетерогенной детонации: в газокапельной среде и в системе газ-пленка.

Возможность инициирования взрыва предварительно сжатых пузырьков преломленными в них УВ.

Модель ударно-волновой динамики и взрыва одиночных пузырьков.

Модель пузырьковой детонации в части описания химических превращений, том числе при наличии межфазного массообмена, обусловленного испарением жидкости и механическим перемешиванием фаз.

Существование детонационных структур в пузырьковых средах со скачкообразным ростом давления на переднем фронте.

Концепцию источника мощных периодических акустических сигналов в жидкости (акустического “лазера”) на основе многократного прохождения ДВ по пузырьковой смеси на основе жидкого монотоплива.

Принципиальную возможность конденсации паров тяжелого углеводородного горючего (а) за фронтом УВ, распространяющейся по переобогащенной горючим газовой смеси и (б) при сжатии и нагреве газа в пузырьке за фронтом УВ, распространяющейся по жидкости. Влияние конденсации на взрывоопасность газовых и пузырьковых систем. Оценку характерного времени конденсации.

Алгоритм расчета минимальной концентрации частиц, обеспечивающей подавление газовой детонации и результаты анализа влияния термодинамических параметров конденсированной фазы на параметры и эффективность подавления ДВ в газопылевой смеси.

Апробация работы. Сокращенный список научных мероприятий, на которых докладывались результаты диссертации: 12th Int. Symp. on Combustion Processes, Bielsko-Biala, Poland, 1991; 5th Int. Symp. on Experimental and Computational Aerothermodynamics of Internal Flows, Gdansk, Poland, 2001; XVI Int. Conf. on Chemical Reactors (Chemreactor-16), Berlin, Germany, 2003; Fourth Int. Seminar on Fire and Explosion Hazards, Londonderry, N. Ireland, UK, 2003; 2nd European Combustion Meeting (ECM), Louvain-la-Neuve, Belgium, 2005; 11th и 12th Int. Symp. on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries (Loss Prevention 2004 и 2007), Prague, Czech Republic (2004) и Rugby, UK (2007); 7th Int. Colloquium on Pulsed and Continuous Detonations, St. Petersburg, Russia, 2010; 24th Int. Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS-2013), Taipei, Taiwan, 2013; 3rd, 7th и 10th Int. Symp. on Hazard, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions (III, VII и X ISHPMIE), Tsukuba, Japan (2000), St. Petersburg, Russia (2008) и Bergen, Norway (2014); 8-й Междунар. конф. “Лаврентьевские чтения ...”, г. Новосибирск, 2015; 13-м, 14-м и 15-м Всеросс. семинарах “Динамика многофазных сред”, г. Новосибирск, 2013, 2015 и 2017 гг.; X Всеросс. конф. с междунар. участием “Горение топлива ...”, г. Новосибирск, 2018; Всеросс. конф. “Физика взрыва ...”, г. Новосибирск, 2018.

Результаты работы использованы в университетских лекционных курсах (Сибирский Государственный Университет Геосистем и Технологий (СГУГиТ, г. Новосибирск) и National Kaohsiung University of Science and Technology (NKUST, Kaohsiung, Taiwan)).

Награды и премии. Работа (в соавторстве) по моделированию неидеальной детонации систем типа газ-конденсированная фаза получила Премию Ленинского комсомола в области науки и техники (1989 г.). Моделирование ДВ в метановых смесях (в соавторстве) вошло в число важнейших результатов СО РАН за 2014 год. Результаты указанных работ, принадлежащие соискателю лично, частично представлены в диссертации.

Публикации. Список публикаций по теме диссертации включает 104 наименования, в том числе 46 статей в рецензируемых научных журналах (36 индексируются в SCOPUS/Web of Science и входят в список ВАК), 7 статей в рецензируемых сборниках научных статей, 3 монографии, 1 патент, 46 полномасштабных трудов научных конференций.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из Введения, пяти Глав, Заключение и Списка литературы. Она изложена на 291 странице, включает 212 рисунков и 5 таблиц. Список литературы включает в себя 104 публикации, написанные соискателем по теме диссертации, и 267 ссылок.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **Введении** обосновывается актуальность работы, указывается цель и новизна исследования, приводятся выносимые на защиту положения, дается общая характеристика работы.

Глава 1 посвящена:

- разработке физически обоснованных, простых и высокоточных обобщенных моделей детонационной химической кинетики и химического равновесия для описания химических превращений в газовых смесях и газопылевых химических реакций в газожидкостных и газопылевых смесях и
- верификации предложенных моделей на конкретных, важных с научной и прикладной точек зрения примерах, в том числе на моделях газокапельной и газопленочной детонации, которые имеют и самостоятельное научное и практическое значение. Изложение основано на работах [1-4, 6, 13, 19, 20, 22, 26-29, 31, 34, 35].

Во введении (п. 1.1) сделан обзор литературы, сформулированы задачи исследования, решению которых посвящена данная Глава. Отмечены примеры успешного использования предложенных в Главе обобщенных моделей химических превращений для решения широкого круга научных и прикладных задач.

Обобщенное моделирование химического равновесия в газовых, газожидкостных и газопылевых смесях представлено в п. 1.2.

В п. 1.2.1 представлены разработанные модели и формулы для описания химического равновесия в газах.

Предложена замкнутая модель химического равновесия в водородо- и углеводородо-кислородных газовых смесях [1, 2], которая являлась развитием незамкнутой и применимой только для водородо-кислородных смесей модели химического равновесия Ю.А. Николаева (1978) [Ю.А. Николаев. Модель кинетики химических реакций при высоких температурах. Физика горения и взрыва. - 1978. – Т. 14, № 4. – С. 73-76.], из которой взяты явные алгебраические зависимости:

$$\mu(\rho, T): \quad \rho / \mu \cdot (1 - \mu / \mu_{\max})^2 / (\mu / \mu_{\min} - 1) \cdot \exp(E / RT) = A / 4K_+, \quad (1)$$

$$U_{\text{chem}}(\mu) = E(1 / \mu - 1 / \mu_{\min}), \quad (2)$$

где μ , ρ , T и U_{chem} – молярная масса, плотность, температура и химическая часть внутренней энергии газа соответственно, R – универсальная газовая постоянная, E , A , K_+ , $\mu_{\min}$, $\mu_{\max}$ – константы модели, имеющие физический смысл. Для получения замкнутой модели химического равновесия, применимой и для водородо-, и углеводородо-кислородных смесей принято во внимание, что при низких и детонационных давлениях и температурах молекулы CO не диссоциируют на атомы, сдвинуто начало отсчета внутренней

энергии и изменен алгоритм вычисления части констант. Предложена явная алгебраическая формула для вычисления термодинамической части внутренней энергии смеси U_{therm} :

$$U_{therm}(T, \mu) = [3 + (3 + 6e^{-\theta/T})(\frac{\mu}{\mu_a} - 1)\frac{1}{2}]\frac{RT}{2\mu}, \quad (3)$$

основанная на анализе зависимости среднего числа степеней свободы молекул от температуры и молярной массы газа, где θ и μ_a – средняя энергия возбуждения колебательных степеней свободы молекул и молярная масса газа в атомарном состоянии соответственно. Таким образом, предложенная замкнутая обобщенная модель химического равновесия в водородо- и углеводородо-кислородных газовых смесях, разработанная автором совместно с Ю.А. Николаевым [1, 2] (обозначим ее аббревиатурой НФ), включает формулы (1), (2), (3) и выражение для расчета полной внутренней энергии смеси U :

$$U(T, \mu) = U_{chem}(\mu) + U_{therm}(T, \mu). \quad (4)$$

Модель позволяет рассчитывать химическое равновесие в смесях, состоящих из атомов C , O , H , и молекул Ar и N_2 (суммарное число атомов C в смеси не должно превышать суммарное число атомов O).

Выведены дополняющие предложенную модель явные алгебраические формулы для расчета термодинамических параметров газовой смеси в состоянии химического равновесия: показателя адиабаты $\gamma_e(T, \mu)$, скорости звука a_e ($a_e^2 = \gamma_e(T, \mu)RT/\mu$) и теплоемкостей при постоянном объеме и давлении $C_v^e(T, \mu)$ и $C_p^e(T, \mu)$ (п. 1.2.2). Например, формулы для расчета теплоемкостей имеют вид:

$$C_v^e = U_T + U_\mu \mu_T, \quad C_p^e = C_v^e + \frac{\rho}{T} \cdot \frac{T/\mu \cdot \mu_T - 1}{1 - \rho/\mu \cdot \mu_\rho} (U_\mu \mu_\rho - \frac{P}{\rho^2}), \quad (5)$$

где явные алгебраические выражения для расчета производных $U_T(T, \mu)$, $U_\mu(T, \mu)$, $\mu_\rho(\rho, T)$, $\mu_T(\rho, T)$ получаются дифференцированием алгебраических зависимостей (1), (4).

Получена аналитическая формула для оценки характерного времени восстановления химического равновесия в газовой смеси τ_* : $\tau_* \approx 10^{-4} P^{-2}$ атм²с, где P – давление в атмосферах (п. 1.2.3).

Предложенная модель химического равновесия проста (явные алгебраические формулы), физически обоснована, соответствует принципу Ле Шателье и обладает высокой точностью (эквивалентная ошибка вычисления молярной массы и внутренней энергии не превышает 3% по температуре). В

течении ряда лет данная модель использовалась (в том числе и другими исследователями) для решения широкого круга научных и прикладных задач.

В работе Николаева-Зака (1988) [Ю.А. Николаев, Д.В. Зак. Согласование моделей химических реакций в газах со вторым началом термодинамики. Физика горения и взрыва. – 1988. – Т. 24, № 4. - С. 87-90.] предложены несколько иные, чем (1), (3) формулы для расчета химического равновесия, согласованные со вторым началом термодинамики. Обозначим аббревиатурой НЗ+ совокупность формул (2), (4) и выражений для расчета $\mu(\rho, T)$ и $U_{therm}(\mu, T)$ из работы Николаева-Зака (1988), дополненных алгоритмом вычисления констант и формулами для расчета показателя адиабаты, скорости звука и теплоемкостей смеси, предложенными в модели НФ, и обыкновенным дифференциальным уравнением для расчета адиабатической кривой в химически равновесном газе (изоэнтропы):

$$\frac{dP}{d\rho} = \frac{P}{\rho} \left(1 - \frac{\rho}{\mu} \mu_\rho\right) + \frac{P}{T} \left(1 - \frac{T}{\mu} \mu_T\right) \frac{dT}{d\rho}, \quad \frac{dT}{d\rho} = - \frac{U_\mu \mu_\rho - RT / \rho \mu}{U_T + U_\mu \mu_T}. \quad (6)$$

Явные алгебраические выражения для расчета производных $U_T(T, \mu)$, $U_\mu(T, \mu)$, $\mu_\rho(\rho, T)$, $\mu_T(\rho, T)$ получаются дифференцированием соответствующих формул модели НЗ+.

Полученная таким образом обобщенная модель химического равновесия НЗ+ проста, физически обоснована, обладает высокой точностью, соответствует принципу Ле Шателье и второму началу термодинамики. Результаты расчета U , μ , γ_e по моделям НФ и НЗ+ практически не отличаются между собой, но НЗ+ предпочтительнее, поскольку физически она более обоснована.

Модели НФ и НЗ+ послужили основой для разработки моделей химического равновесия в газожидкостных и газопылевых смесях, разработанных в рамках настоящей диссертации.

Предложена обобщенная модель химического равновесия в газожидкостных смесях при наличии испарения жидкости (п. 1.2.4). Полагалось, что химические реакции происходят в газе, пространственный градиент химического состава газовой смеси отсутствует. Вид формул для вычисления внутренней энергии, молярной массы, тепловыделения, скорости звука и теплоемкостей по сравнению с гомогенной газовой смесью остается неизменным. Но при этом константы модели зависят от суммарной массы перешедшей в газ жидкости M и ее химического состава.

Разработана обобщенная модель химического равновесия в смеси газа с химически инертными микрочастицами (п. 1.2.6). Указан алгоритм использования модели для качественного описания химического равновесия в смесях газа и сажи. В рамках модели полагается, что химические реакции протекают только в газе, газ и частицы находятся в тепловом равновесии друг

с другом, парциальное давление и объем конденсированной фазы равны нулю, частицы не дают вклада в давление. Получены явные алгебраические выражения для расчета термодинамических параметров рассматриваемой двухфазной смеси, которые зависят от P , T и массовой доли конденсированной фазы в двухфазной смеси α . Например, формулы для расчета теплоемкостей при постоянном объеме и давлении $C_V^e(T, \mu, \alpha)$, $C_P^e(T, \mu, \alpha)$ и уравнение для расчета адиабаты (аналоги (5) и (6)) имеют вид:

$$C_V^e = (1-\alpha)(U_T + U_\mu \mu_T) + \alpha U_T^C, \quad C_P^e = C_V^e + (1-\alpha) \frac{\rho}{T} \cdot \frac{T/\mu \cdot \mu_T - 1}{1 - \rho/\mu \cdot \mu_\rho} (U_\mu \mu_\rho - \frac{P}{\rho^2}), \quad (7)$$

$$\frac{dP}{d\rho} = \frac{P}{\rho} (1 - \frac{\rho}{\mu} \mu_\rho) + \frac{P}{T} (1 - \frac{T}{\mu} \mu_T) \frac{dT}{d\rho}, \quad \frac{dT}{d\rho} = - \frac{(1-\alpha)(U_\mu \mu_\rho - RT/\rho\mu)}{(1-\alpha)(U_T + U_\mu \mu_T) + \alpha U_T^C}. \quad (8)$$

При отсутствии конденсированной фазы, т.е. при $\alpha \rightarrow 0$ (7), (8) переходят в (5), (6). Характерный расчет теплоемкостей газовой ($\alpha = 0$) и газопылевой смесей в состоянии химического равновесия по (5), (7) представлен на Рис. 1.1а. На Рис. 1.1б представлен модельный расчет по (6), (8) адиабатических (изоэнтропических) кривых смеси водорода с химически инертными твердыми микрочастицами, находящейся в состоянии химического равновесия. Плотность газа $\rho_0 = 10^{-4}$ кг/м³, $\alpha = 0$ (сплошные кривые) и $\alpha = 0.4$ (штриховые кривые). Теплоемкость микрочастиц соответствует графиту.

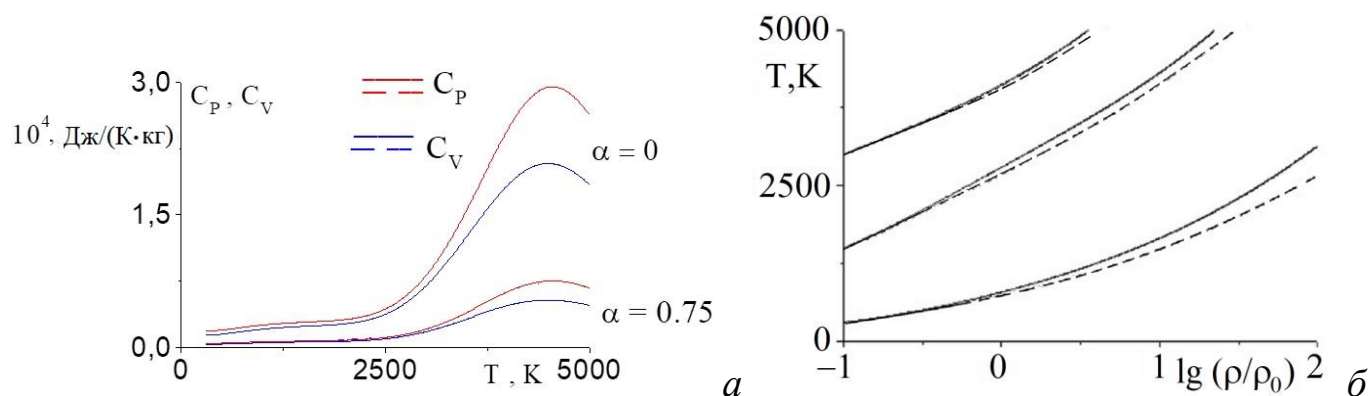
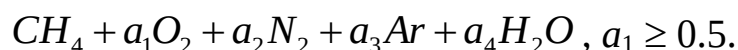


Рис. 1.1. (а): Зависимость теплоемкостей смеси $2H_2+O_2$ + частицы вольфрама, находящейся в состоянии химического равновесия, от температуры. (б): Адиабаты смеси водорода с химически инертными твердыми микрочастицами, находящейся в состоянии химического равновесия. Теплоемкость микрочастиц соответствует графиту.

Обобщенные модели химической кинетики детонационного сгорания газов, разработанные в рамках диссертации, представлены в п. 1.3.

Предложенная модель кинетики детонационного сгорания метана представлена в п. 1.3.1. Рассматривалась смесь вида:



При разработке модели за основу взята модель кинетики Николаева-Зака (1988). Данная модель применима только для водородо-кислородных смесей и не могла быть использована для метановых смесей без существенного развития.

Первая стадия предлагаемой двустадийной модели кинетики – период индукции, вторая – зона основного тепловыделения. Формула для расчета длительности периода индукции τ_i при постоянных параметрах полагается известной. Параметр индукции Y вычисляется по распространенной в практике обобщенного моделирования химических превращений в ДВ формуле:

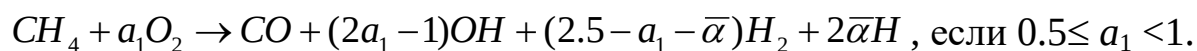
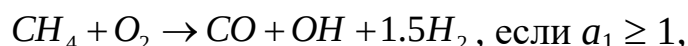
$$Y(t) = \int_0^t dt / \tau_i ; t = 0, Y = 0; Y = 1 \text{ при } t = \tau, \tau - \text{период индукции при переменных}$$

параметрах смеси.

Реальные многостадийные процессы, проходящие во время периода индукции, заменялись *брутто*-реакцией, которая выбиралась на основании следующих общих соображений.

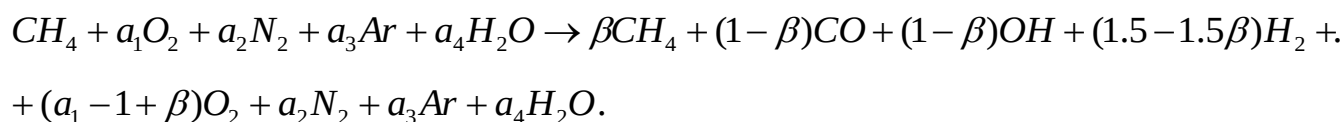
1. Рост температуры (и, соответственно, тепловыделение химических реакций) к моменту окончания периода индукции невелик. Поэтому *брутто*-реакцию выберем таким образом, чтобы ее тепловой эффект был много меньше максимально возможного теплового эффекта, соответствующего полной рекомбинации продуктов реакции с образованием CO_2 и H_2O . При выполнении этого условия тепловой эффект *брутто*-реакции будет много меньше и теплового эффекта в точке Ч.-Ж.

2. Во время периода индукции происходят химические реакции, связанные с появлением и ростом количества активных центров и развалом молекул CH_4 . К моменту окончания периода индукции все молекулы CH_4 разлагаются. Каждая молекула метана во время периода индукции рано или поздно испытывает следующее химическое превращение:



Величина $\bar{\alpha}$ подбирается из условия малости теплового эффекта *брутто*-реакции по сравнению с максимально возможным тепловым эффектом.

Пусть β – доля молекул метана, не претерпевших химическое превращение к некоторому моменту времени t ($\beta = 1$ при $t = 0$; $\beta = 0$ при $t = \tau$). Тогда, например, при $a_1 \geq 1$, химический состав газа в произвольный момент времени внутри зоны индукции будет иметь вид:



Полагалось, что β монотонно убывает в зоне индукции, и скорость уменьшения β при этом растет. В соответствии с этим условием в модели использовано следующее соотношение между β и Y : $\beta = 1 - Y$.

Перечисленные предположения и соотношения позволяют по явным алгебраическим формулам рассчитать концентрации реагирующих компонент в любой момент времени внутри зоны индукции, и, соответственно, найти молярную массу и внутреннюю энергию смеси.

После окончания периода индукции (в зоне основного тепловыделения ДВ) детальный химический состав смеси не вычисляется, а молярная масса газа рассчитывается с помощью кинетического уравнения из работы Николаева-Зака (1988):

$$\frac{d\mu}{dt} = 4K_+ \frac{\rho^2}{\mu} \left(1 - \frac{\mu}{\mu_{\max}}\right)^2 - AT^{3/4} (1 - e^{-\theta/T})^{3/2} \rho \left(\frac{\mu}{\mu_{\min}} - 1\right) e^{-E/RT}.$$

После описанной трансформации смеси в брутто-реакции, оно становится справедливым не только для водородо-кислородных, но и для метановых смесей. Для расчета показателя адиабаты, внутренней энергии смеси и теплового эффекта химической реакции предложены явные алгебраические зависимости от молярной массы и температуры.

Модель кинетики описывает и состояние химического равновесия, когда правая часть кинетического уравнения зануляется. В этом случае модель кинетики переходит в модель химического равновесия НЗ+: термодинамические параметры химически равновесной смеси рассчитываются по соответствующим явным алгебраическим формулам.

Предлагаемая модель удовлетворяет принципу Ле-Шателье и второму началу термодинамики. Константы модели имеют четкий физический смысл. Она проста, позволяет существенно сократить объем численных расчетов и упростить анализ результатов по сравнению с детальными кинетическими моделями, включающими в себя громоздкие системы жестких обыкновенных дифференциальных уравнений. Использование модели позволило рассчитать нерегулярную ячеистую структуру ДВ со всеми основными ее особенностями, наблюдаемыми в эксперименте (А.В. Троцюк [26, 27]). Рассчитанные размеры детонационной ячейки при этом также хорошо соответствовали эксперименту. Все это свидетельствует о высокой точности предлагаемой кинетической модели.

В п. 1.3.2 изложена обобщенная модель химической кинетики детонационного сгорания углеводорода произвольного состава C_nH_m . Она является обобщением предложенной модели кинетики для метана ($n = 1$, $m = 4$). Величина периода индукции полагается известной. Вопрос о применимости модели необходимо решать для каждой смеси отдельно.

В п. 1.3.3 представлены обобщенные двустадийные модели химической кинетики детонационного сгорания смесей двух и более горючих.

Рассмотрены следующие смеси: CO/H_2 , CH_4/CO , CH_4/H_2 , $CH_4/CO/H_2$, C_nH_m/CO , C_nH_m/H_2 , $C_nH_m/H_2/CO$ и смеси двух- и более углеводородных горючих вида C_nH_m без и в присутствии CO и H_2 .

Предложенные модели являются развитием соответствующих моделей для отдельных горючих. Величина периода индукции полагается известной. При написании брутто-реакции, описывающей период индукции, принималось, что молекулы CO и H_2 , изначально присутствующие в смеси, химических превращений во время периода индукции не испытывают. Соответственно, химических превращений в синтез-газе (смесь CO и H_2 с окислителем) во время периода индукции не происходит.

В зоне основного тепловыделения используется аналогичное кинетическое уравнение для расчета молярной массы газа, и те же алгебраические формулы для расчета внутренней энергии, тепловыделения, показателя адиабаты и теплоемкости, что и для смесей одного горючего с окислителем.

Практика численных двумерных расчетов параметров и структуры ДВ в стехиометрических смесях синтез-газа с окислителем показала высокую эффективность и точность предложенной кинетической модели при различных соотношениях между горючими.

В п. 1.3.4 представлена двустадийная обобщенная модель химической кинетики детонационного сгорания газовой смеси, содержащей монотопливо (водородо-кислородная смесь с добавками H_2O_2). Полагалось, что во время периода индукции разложение H_2O_2 , полностью заканчивающееся к моменту его окончания, идет по брутто-реакции: $H_2O_2 + H_2 \rightarrow 2H_2O$. После окончания периода индукции модель аналогична предложенным моделям кинетики для углеводородов. Использование модели позволило получить в расчетах двухразмерную бифуркационную ячеистую структуру ДВ (расчет А.В. Троцюка [13]).

Представленные в настоящей Главе модели детонации в газокапельной и газопленочной смесях иллюстрируют возможности предложенных моделей химического равновесия и имеют самостоятельный научный и практический интерес.

В п. 1.2.5 изложена модель стационарной ДВ в газокапельной среде. Она построена с учетом периода индукции, сдвига химического равновесия, деформации и дробления капель, потерь в стенки трубы, и позволяет находить скорость детонации, длину зоны реакции и распределение параметров смеси внутри зоны реакции. Считалось, что в момент истечения периода индукции смесь мгновенно приходит в состояние химического равновесия, которое сдвигается по мере движения смеси вниз по потоку. Для описания термодинамических свойств смеси использована предложенная в данной Главе модель химического равновесия в газожидкостной смеси. Система

обыкновенных дифференциальных уравнений интегрировалась численно по координате методом “стрельбы”.

Результаты расчета давления, длины зоны реакции и зависимости скорости детонации от начального размера частиц удовлетворительно коррелируют с экспериментом (смеси: диэтилциклогексан (ДЭЦГ, $C_{10}H_{20}$) (жидкость) - O_2 и N_2 (газ)). Характерный расчет профиля ДВ представлен на Рис. 1.2а-в (криогенная стехиометрическая смесь H_2 (жидкость) - O_2 (газ)). Здесь $T_0 = 80$ К, $P_0 = 1$ атм, X – расстояние от переднего ударного фронта волны, начальный диаметр капель $d_0 = 100$ мкм, число частей N , на которые однократно дробится микрокапля после достижения критической стадии деформации – 125, m и m_0 – текущая и начальная масса капли, ρ и u – плотность и скорость газа, ρ_k и u_k – объемная плотность и скорость капель, Q и Q_{max} – удельный (на единицу массы испарившейся жидкости) тепловой эффект и его максимально возможное значение, Q_1 – удельный тепловой эффект, рассчитанный в предположении полной газификации капель. Видно, что молярная масса газа и удельный (на единицу массы испаренной жидкости) тепловой эффект химической реакции существенно переменные. Скачок параметров связан с мгновенной реакцией после истечения периода индукции, излом кривых – с дроблением капель.

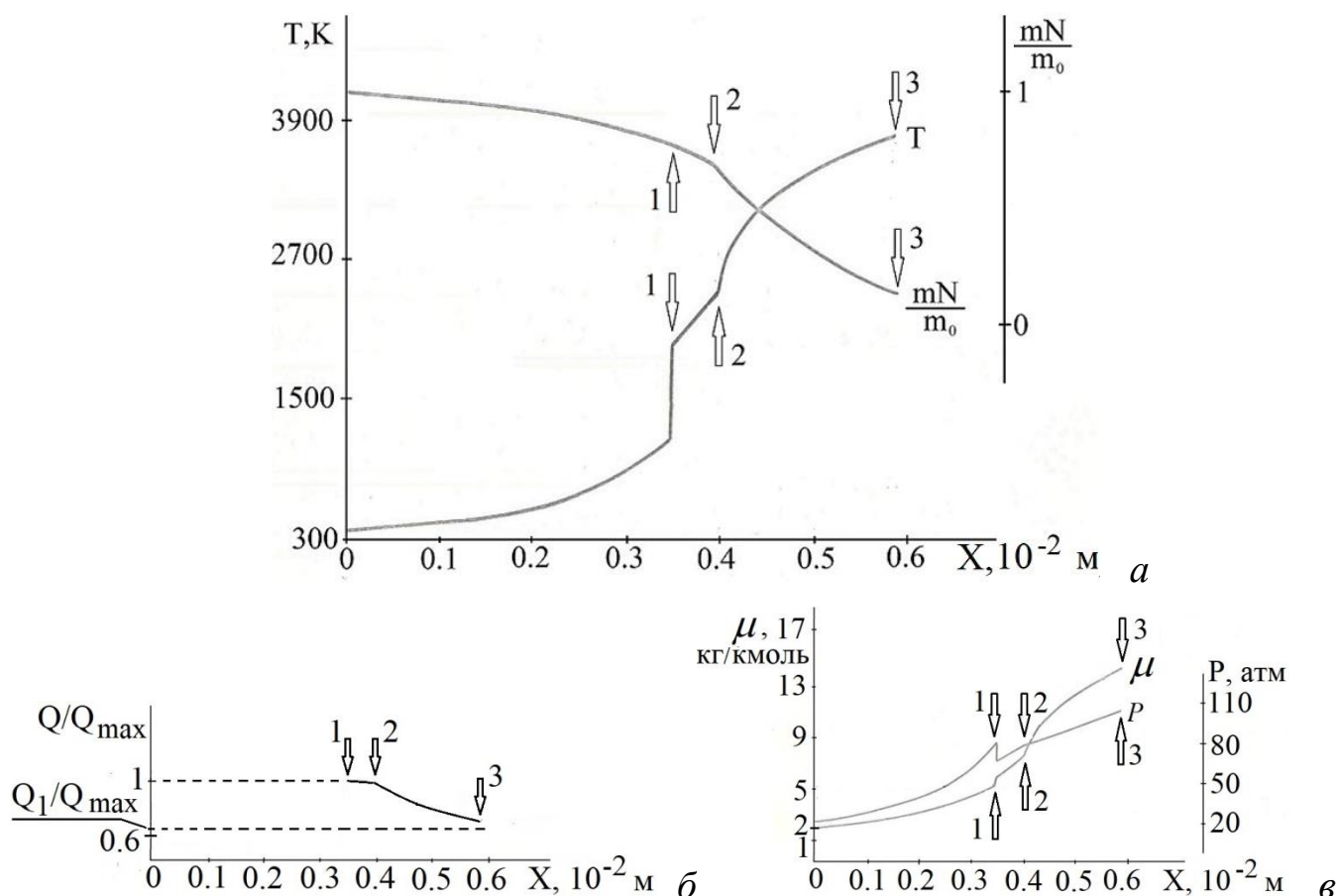


Рис. 1.2. Профиль параметров стационарной ДВ в газокapельной смеси. Стрелочки соответствуют: 1 – окончанию периода индукции, 2 – дроблению капель, 3 – плоскости Чепмена-Жуге.

В п. 1.2.7 представлена модель стационарной детонационной волны в переобогащенной горючим системе: пленка жидкого горючего - газ. Она построена с учетом непостоянства параметров смеси по сечению трубы, сдвига химического равновесия, наличия сажи в продуктах реакции. Модель позволяет вычислять скорость детонации u_0 , оценивать длину зоны реакции, а также находить в плоскости Ч.-Ж. давление, температуру и профиль распределения параметров по радиусу трубы плотности двухфазной смеси газа и сажи $\tilde{\rho}$, скорости u , молярной массы μ и плотности ρ газа.

Использование предложенных в диссертации моделей химического равновесия в газовых и газопылевых смесях и полуэмпирического профиля распределения массовой доли кислорода C_O (неважно, в составе каких компонент находящегося) по сечению трубы, позволило впервые учесть появление сажи и сильное непостоянство термодинамических параметров смеси по сечению трубы и в зоне реакции.

Система алгебраических уравнений замыкается условиями $u_e = \tilde{a}$ и $F = 0$; u_e – скорость газа на оси трубы, $\tilde{a}$ и F представляют собой комбинации интегралов по сечению трубы от алгебраических функций, зависящих от радиуса трубы, u_0 , массовой координаты и параметров потока в плоскости Ч.-Ж. Величина $\tilde{a}$ может трактоваться как усредненная по сечению скорость звука в канале с переменной по сечению трубы истинной скоростью звука. Плоскость Ч.-Ж. является одномерным аналогом поверхности Ч.-Ж.

Рассмотрена система: жидкий ДЭЦГ – O_2 , $P_0 = 1$ атм и $T_0 = 293$ К. Рассчитанные величины u_0 и давления в плоскости Ч.-Ж. удовлетворительно соответствуют эксперименту. Распределение по радиусу трубы r в плоскости Ч.-Ж. величин ρ , $\tilde{\rho}$, C_O , μ и скорости газа u представлены на Рис. 1.3: 1 - ρ ; 2- $\tilde{\rho}$; 3 - u , C_O ; 4 - μ . Ось трубы соответствует $r = 0$, стенка - $r = r_0$.

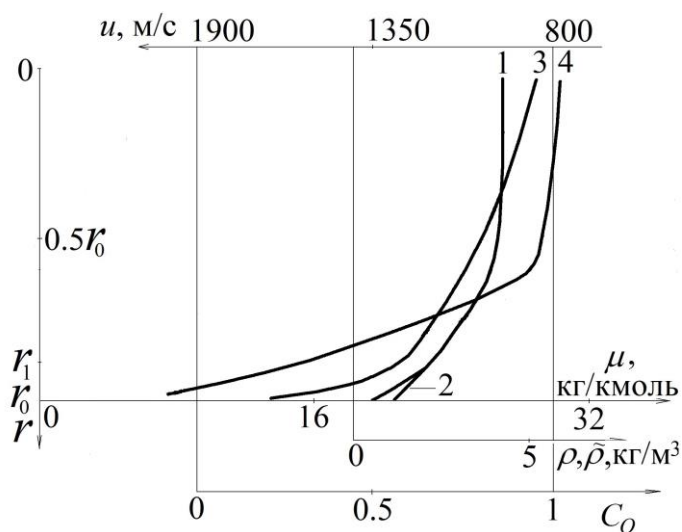


Рис. 1.3. Распределение параметров стационарной ДВ в смеси газ-пленка по поперечной координате в плоскости Чепмена-Жуге.

Видно, что μ по сечению трубы меняется на порядок, а вблизи стенки трубы ($r_1 < r < r_0$, $r_1 \approx 0.9r_0$) присутствует сажа. Переобогащение смеси горючим более, чем в 1.4 раза по сравнению со стехиометрией, не влияет на u_0 , что соответствует эксперименту.

Выводы по Главе 1 представлены в п. 1.4.

Глава 2 посвящена теоретическому и экспериментальному исследованию взрывных и детонационных процессов в химически реагирующих пузырьковых средах (изложение основано на работах [5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15, 24, 25, 28]).

Во введении (п. 2.1) представлен обзор литературы и дана характеристика состояния исследований в рассматриваемой области, сформулированы задачи исследования, решение которых представлено в данной Главе.

Сделан анализ процессов механического перемешивания фаз при генерации УВ в пузырьковой смеси волной газовой детонации (п. 2.2.1). Использовались соответствующие кадры высокоскоростной видеосъемки, полученные коллегами соискателя и представленные в [14].

Предложено генерировать УВ в химически активной пузырьковой среде свободно падающим твердым телом при его ударе о поверхность раздела фаз (п. 2.2.2). Выполнены расчеты, на основании которых в Федеральном центре по исследованию и тестированию материалов (BAM, Berlin, Germany) создана соответствующая экспериментальная установка.

Проанализированы кадры высокоскоростной видеосъемки взаимодействия УВ, распространяющейся по жидкости, с кластером пузырьков (п. 2.3.1). Видеосъемка (представлена в [12]) выполнена коллегами соискателя. Впервые зарегистрировано инициирование взрыва химически активных пузырьков преломленными в них вторичными УВ, порожденными взрывами соседних пузырьков. Необходимым условием такого инициирования является предварительное сжатие пузырьков в первичной УВ, не приводящее к взрыву, но существенно увеличивающее акустическое сопротивление газа.

Схемы характерных кадров видеосъемки, которые иллюстрируют эффект инициирования взрыва пузырьков как первичной УВ, так и преломленными УВ, представлены на Рис. 2.1 (кислородсодержащие пузырьки в жидком циклогексане (C_6H_{12}) при нормальных начальных условиях). Жидкость окрашена серым цветом, газ в пузырьках до взрыва – белым, после – черным. Пузырьки не сферичны. Точный масштаб не соблюдается. Времена после начала нагружения кластера УВ: 0 (а), 8 (б), 33 (в), 35 (г) и 38 (д) микросекунд. Первичная УВ видна на втором кадре. Она не инициирует взрывы пузырьков преломленными в газ УВ, поскольку они достаточно слабы вследствие малости акустического сопротивления газовой фазы. Адиабатическое сжатие и нагрев пузырьков за фронтом первичной УВ приводит к взрывам 1 и 3 пузырьков (3 кадр) и образованию вторичных УВ вследствие расширения продуктов взрыва. На 4 кадре вторичные волны от взрыва 1 и 3 пузырьков

падают на 2 (поджатый первичной УВ) пузырек, после чего происходит его “мгновенное” воспламенение преломленными УВ (от момента падения вторичных УВ до момента воспламенения пузырек не успевает изменить свои размеры). Вторичная УВ от этого взрыва падает на 4 пузырек (5 кадр), который воспламеняется преломленной волной.

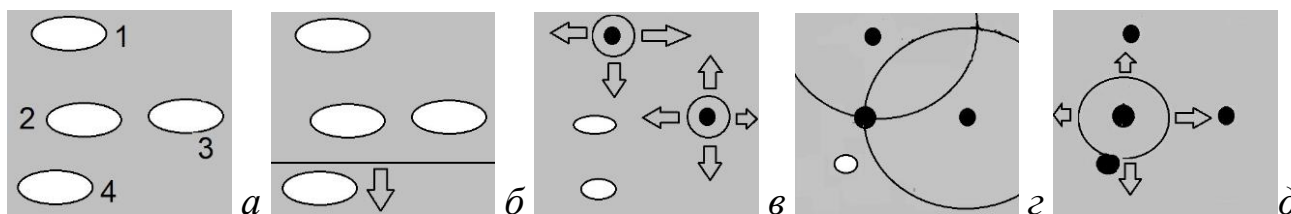


Рис. 2.1. Процесс инициирования взрыва пузырьков первичной УВ и преломленными УВ, вызванными взрывами соседних пузырьков.

Обнаруженный эффект инициирования преломленной УВ подкреплён оценкой температуры газа за ее фронтом, которая, при достаточно близком расстоянии между взорвавшимся и сжатым пузырьком, превышает температуру самовоспламенения (п. 2.3.2).

В п. 2.5 представлены результаты моделирования динамики и взрыва одиночного пузырька в УВ, распространяющейся по жидкости.

В п. 2.5.1 изложена модель взрыва одиночного пузырька в УВ, построенная с учетом сжимаемости и вязкости жидкости, потерь энергии на акустическое излучение, межфазного тепло- и массообмена, механического перемешивания фаз, периода индукции, сдвига химического равновесия, наличия микрочастиц сажи в продуктах химической реакции. Межфазный тепло- и массообмен, вызванный механическим перемешиванием фаз, моделируется мгновенной инъекцией в газ жидких микрокапель, и их последующим испарением. Полагается, что в момент истечения периода индукции и происходит мгновенный взрыв газа: его состав скачком приходит в состояние химического равновесия, которое сдвигается вследствие динамики пузырька. Химические превращения в пузырьке описываются по представленным в Главе 1 моделям химического равновесия газовых и газожидкостных систем.

Модель позволяет рассматривать водородо- и углеводородо-кислородные системы с горючим и окислителем, находящимися как в одной (системы I типа), так и в разных фазах (системы II типа), гибридные системы и системы на основе жидких монотоплив. Она позволяет учесть сильное непостоянство молярной массы, показателя адиабаты и тепловыделения вследствие химических превращений при наличии межфазного массообмена.

Результаты расчетов динамики и взрыва одиночных пузырьков по предложенной модели представлены в п. 2.5.2. Рассмотрены водородо-кислородные пузырьки с горючим и окислителем, находящимися как в одной,

так и в разных фазах (п. 2.5.2.1), нереагирующие пузырьки со взвешенными в газе микрочастицами сажи (п. 2.5.2.2) и гибридные углеводородо-кислородные пузырьки (п. 2.5.2.2). Характерный расчет динамики и взрыва пузырька (гибридная пузырьковая система на основе жидкого циклогексана) представлен на Рис. 2.2. Скачок параметров в момент времени $t = 11.2$ мкс после начала сжатия соответствует взрыву, P_{shock} – амплитуда УВ в жидкости, R_0 , R и D_0 – начальный и текущий радиусы пузырька и начальный диаметр микрокапель, M – суммарная масса микрокапель, диспергируемых в газ при $R/R_0 = 3$ ($t = 10.8$ мкс), M_0 – начальная масса газа в пузырьке.

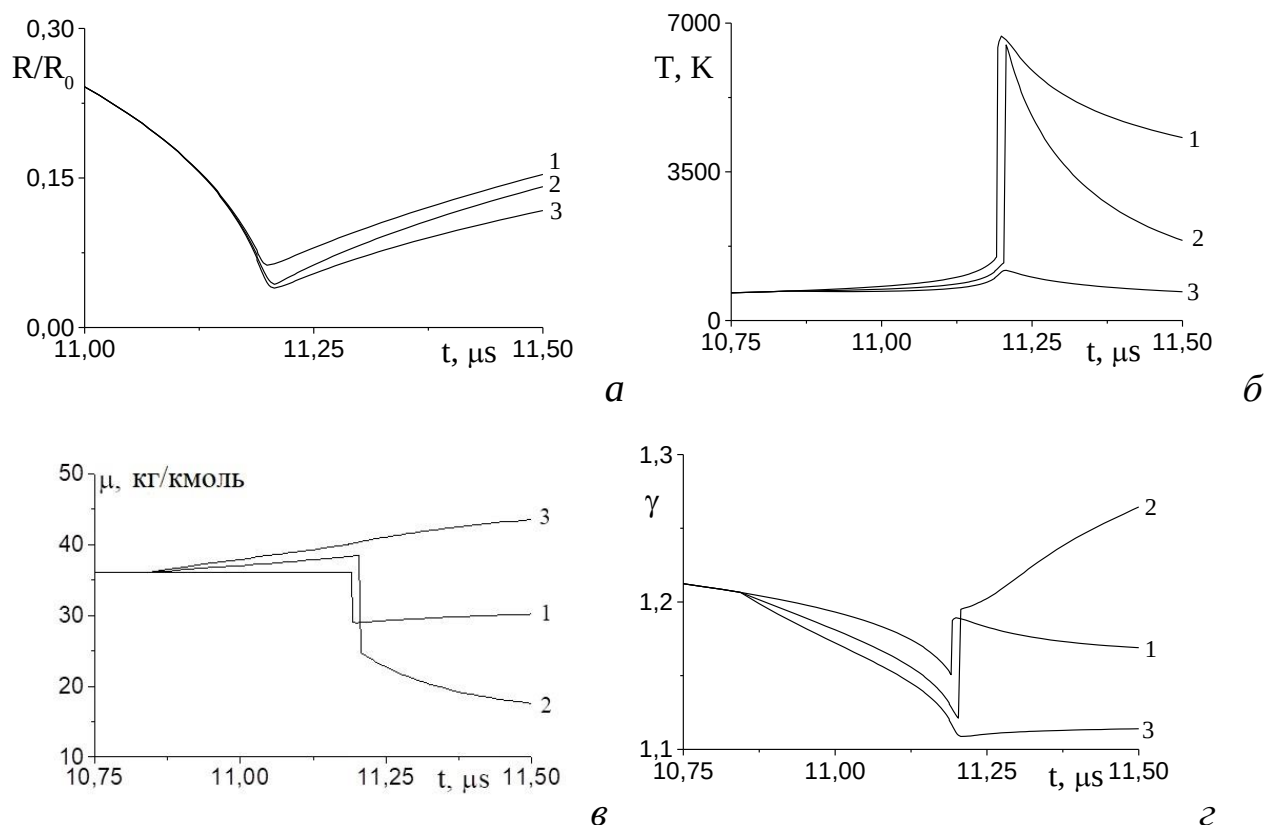


Рис. 2.2. Результаты расчета параметров пузырька при его взрыве (первая пульсация). Смесь $[0.081 \text{ C}_6\text{H}_{12} + 0.919 \text{ O}_2]$ (газ) – $[\text{C}_6\text{H}_{12}]$ (жидкость); $T_0 = 288 \text{ K}$, $P_0 = 1 \text{ атм}$, $D_0 = 1 \text{ мкм}$, $R_0 = 1.6 \text{ мм}$, $P_{shock} = 120 \text{ атм}$. 1: $M = 0$; 2: $M = 0.5M_0$; 3: $M = M_0$ (взрыва нет).

Расчет параметров и структуры волны пузырьковой детонации при нормальных начальных давлениях представлен в п. 2.6. В рамках моделирования пузырьковой детонации предложен алгоритм учета влияния межфазного массообмена на термодинамические параметры смеси, сдвига химического равновесия и возможного наличия микрочастиц сажи в продуктах химической реакции. Для этого использованы подходы, предложенные для описания взрыва одиночных пузырьков. Это позволяет рассмотреть как пузырьковые системы I типа, так и системы II типа, а также гибридные углеводородо-кислородные системы и пузырьковые системы на основе жидких монотоплив. Рис. 2.3 демонстрирует хорошее соответствие выполненного расчета скорости и пределов детонации с экспериментом [А.В.

Пинаев, А.И. Сычев. Влияние физико-химических свойств газа и жидкости на параметры и условия существования волны детонации в системах жидкость – пузырьки газа. Физика горения и взрыва. – 1987. – Т. 23, № 6. – С. 76-84.]; k_0 – объемная доля газа в двухфазной смеси, u_0 – скорость детонации; R_0 и R – начальный и текущий радиусы пузырька, $R_0 = 1.6$ мм; $P_0 = 1$ атм, $T_0 = 293$ К; H_2 , % – мольная доля водорода в пузырьке.

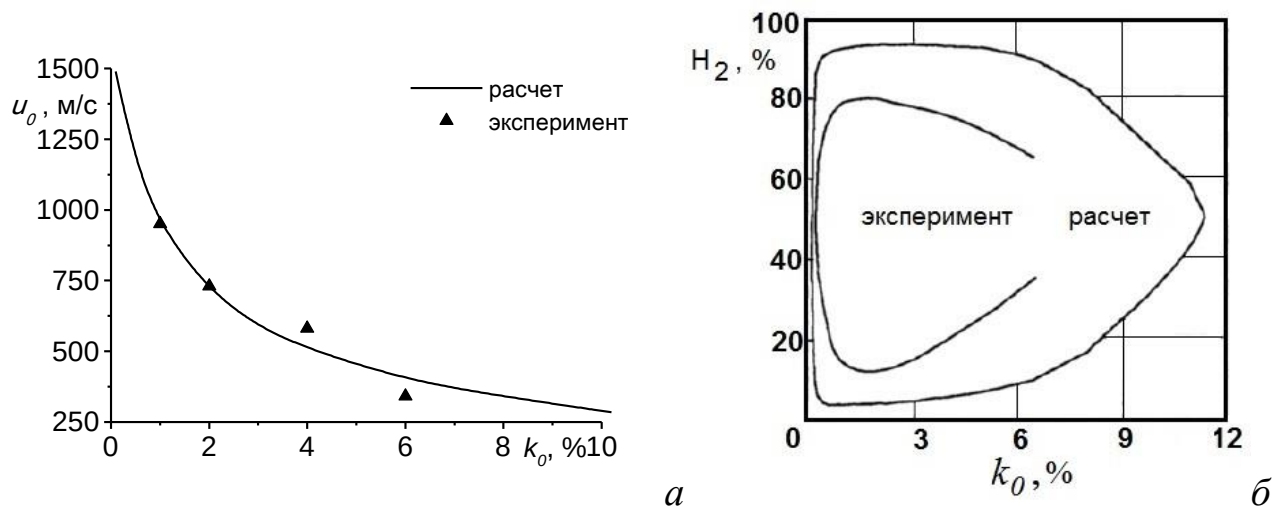


Рис. 2.3. Сравнение результатов расчета параметров волны пузырьковой детонации с экспериментом. а: $2H_2 + O_2$ (газ) – $0.5 H_2O + 0.5$ глицерин (жидкость). б: H_2/O_2 (газ) – $0.5 H_2O + 0.5$ глицерин (жидкость).

В п. 2.7 представлены результаты расчета параметров волны пузырьковой детонации при повышенных начальных давлениях P_0 (Рис. 2.4, смесь $2H_2 + O_2$ (газ) – $0.5 H_2O + 0.5$ глицерин (жидкость); (а): $k_0 = 4\%$, (б): $P_0 = 100$ атм, (в): $P_0 = 1$ атм, $u_0 = 980$ м/с, $k_0 = 1\%$, (г): $P_0 = 150$ атм, $u_0 = 1882$ м/с, $k_0 = 1\%$). Показано, что при достаточно больших P_0 скорость пузырьковой детонации u_0 , которая всегда является сверхзвуковой по “равновесной” по физическим процессам скорости звука, становится сверхзвуковой и по “замороженной” по физическим процессам скорости звука c_f (Рис. 2.4а). Увеличение объемной доли пузырьков k_0 в смеси может сменить режим распространения детонации со “сверхзвукового” (по c_f) на “дозвуковой” (Рис. 2.4б). Профили волны при до- и сверхзвуковом (по c_f) режимах существенно отличаются (Рис. 2.4в,г). Предвестник существует только при дозвуковом режиме, когда $u_0 < c_f$. При сверхзвуковом режиме имеет место скачок давления на переднем ударном фронте волны (сглажен разностной схемой).

В п. 2.8 качественно рассмотрены периодические взрывные процессы в пузырьковых средах на основе жидких монотоплив. На основании физических предположений сделано заключение, что при отсутствии неустойчивостей через рассматриваемую среду возможно многократное прохождение ДВ, сопровождающееся схлопыванием пузырьков, ростом температуры, “впрыском” новой порции монотоплива в газ и последующим взрывом. Таковую систему можно рассматривать как акустический аналог лазерных систем

(акустический “лазер”). Принципиально новым в данной концепции является периодическая “накачка” “лазера” и периодическое же излучение акустических сигналов.

Выводы по Главе 2 представлены в п. 2.9.

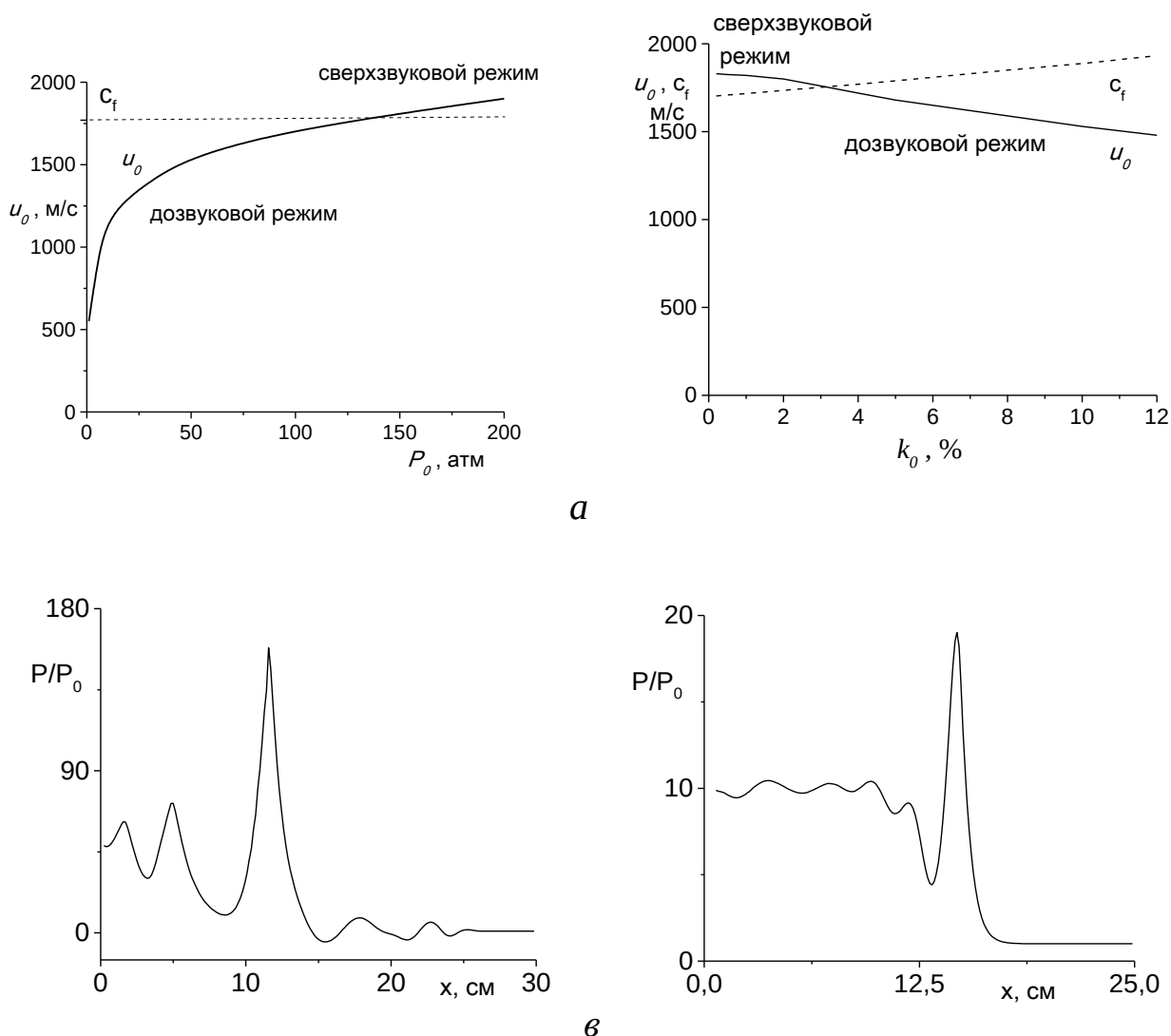


Рис. 2.4. Зависимость скорости детонации от P_0 (а) и k_0 (б) при до- и сверхзвуковом (по c_f) режимах распространения. Профиль давления при до- (в) и сверхзвуковом (г) режимах.

В Главе 3 (изложение основано на работах [18, 28]): показана принципиальная возможность конденсации паров горючего в ударной волне, распространяющейся по газовой смеси (пары циклогексана (C_6H_{12}) с окислителем); проанализировано влияние рассматриваемого процесса на взрывобезопасность; сделана оценка характерного времени конденсации и рассмотрено влияние газовой смеси твердых частиц на массу перешедших в жидкость паров и характерное время конденсации.

Во Введении (п. 3.1) рассмотрены стандартные формулы для плоской УВ в газе с постоянным показателем адиабаты γ .

$P/P_0 = 2\gamma/(\gamma+1) \cdot M^2 - (\gamma-1)/(\gamma+1)$, $T/T_0 = [2\gamma M^2 - (\gamma-1)]/[(\gamma+1)^2 M^2]$,
 $M = D/c_0$, $c_0 = (\gamma P_0 / \rho_0)^{0.5}$, где P , T , ρ , M , c – давление, температура, плотность, число Маха и скорость звука соответственно, индекс “0” относится к начальному состоянию. Показано, что принципиальная возможность конденсации паров за фронтом УВ в газовых смесях связана с условием: $\gamma \approx 1$, что может иметь место, например, при сильном переобогащении смеси парами углеводородного горючего с большой теплоемкостью. Например, состав смеси, состоящей из O_2 и насыщенных паров циклогексана (C_6H_{12}) при $T_0 = 351$ К и $P_0 = 0.1$ МПа имеет вид $0.933C_6H_{12} + 0.067O_2$, а ее $\gamma = 1.06$. При $\gamma \rightarrow 1$ скачок температуры на фронте стремится к нулю, и, соответственно, давление насыщенных паров горючего P_{sat}^f (зависит от температуры) при переходе через фронт остается постоянным. В то же время давление смеси и парциальное давление паров P^f растут. Следовательно, при распространении УВ по насыщенной смеси (начальные значения P_{sat}^f и P^f равны), за ее фронтом выполняется условие $P_{sat}^f > P^f$ и конденсация становится возможной. Рассматриваемый эффект нетривиален: для большинства газовых смесей условие $\gamma \approx 1$ несправедливо и конденсация паров в УВ невозможна.

Конденсация имеет принципиальное значение для взрывобезопасности газовых смесей. Она может существенно (до нескольких раз) увеличить содержание окислителя в газе. В результате смеси, начальная концентрация паров горючего в которых превышает Верхний Концентрационный Предел Воспламенения (ВКПВ), т.е. смеси, которые формально считаются пожаро- и взрывобезопасными, могут, тем не менее, взрываться, если конденсация сдвинет состав смеси в область воспламенения. На Рис. 3.1 показано изменение концентрации паров вследствие конденсации. НКПВ – Нижний Концентрационный Предел Воспламенения, А – начальная концентрация паров. Стрелочка показывает, что вследствие конденсации состав сдвигается в область воспламенения.

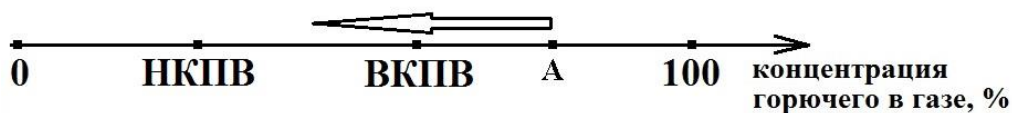


Рис. 3.1. Изменение концентрации горючего в газовой фазе за УВ при наличии конденсации.

Модели стационарной плоской УВ без и с учетом конденсации паров представлены в п. 3.2, а соответствующие результаты расчетов в п. 3.3. Расчет зависимости парциального давления паров горючего P^f , давления его насыщенных паров P_{sat}^f и параметра переохлаждения θ от скорости D плоской УВ без учета конденсации представлен на Рис. 3.2. Смесь: $0,076 O_2 + 0,351 N_2 + 0,573 C_6H_{12}$ ($P_0 = 1,3$ МПа, $T_0 = 439$ К), C_0 – скорость звука, $\theta = (T_{sat} - T)/T_{sat}$,

где T_{sat} – температура паров, насыщенных при данной плотности. Начальная смесь соответствует ВКПВ (точка А на Рис. 3.1 совпадает с ВКПВ). Пары перед фронтом являются насыщенными. Параметры волны рассчитаны по стандартной системе алгебраических уравнений: законов сохранения и уравнения состояния. Если конденсация возможна, то система уравнений описывает параметры потока сразу за фронтом волны, до момента начала конденсации. Как видно из Рис. 3.2, при $D < 1137$ м/с $P^{C_6H_{12}} > P_{sat}^{C_6H_{12}}$. При таких скоростях волны конденсация паров возможна: $\theta > 0$. В противном случае полагаем $\theta = 0$.

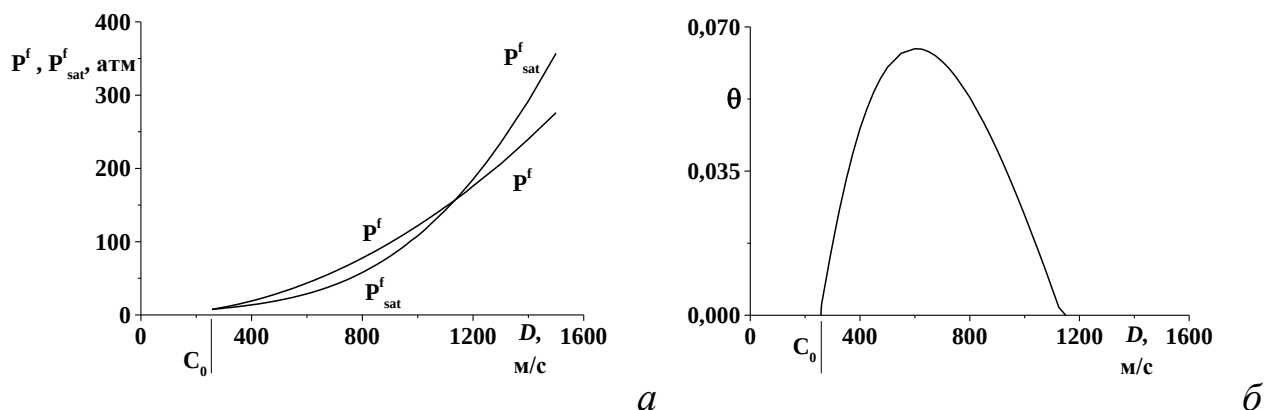


Рис. 3.2. Результаты расчета параметров P^f , P_{sat}^f и θ за фронтом плоской УВ без учета конденсации.

На Рис. 3.3 представлен расчет параметров плоской УВ с учетом конденсации. Решена система алгебраических уравнений состояния, законов сохранения и условия $P^f = P_{sat}^f$, т.е. параметры волны соответствуют моменту окончания конденсации. Рассмотрена та же смесь, что и на Рис. 3.2.

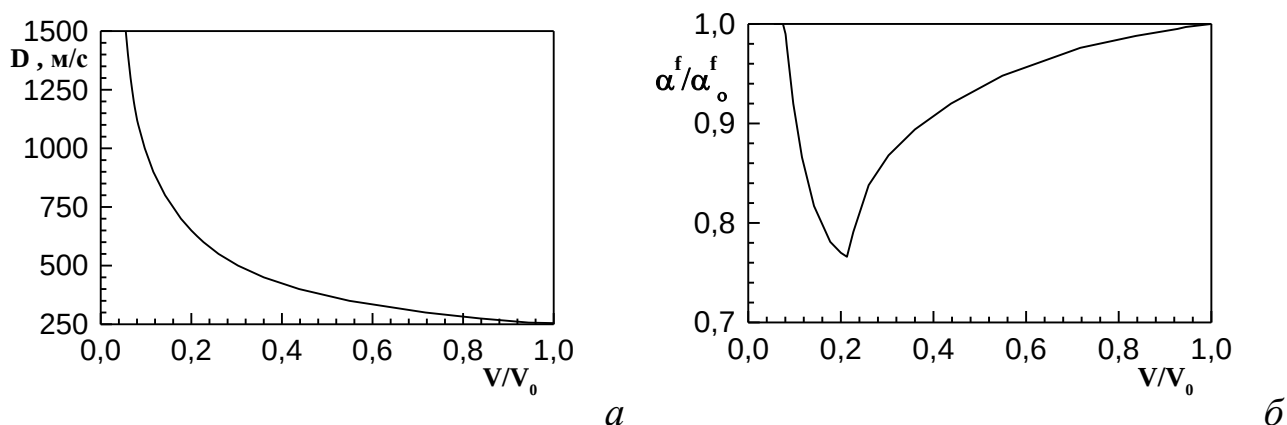


Рис. 3.3. Параметры плоской УВ в газовой смеси с учетом конденсации.

Без конденсации (при $D = C_0$ или $D > 1137$ м/с) состав газа не меняется: $\alpha^f / \alpha_0^f = 1$, α^f – мольная доля паров. Конденсация (при $C_0 < D < 1137$ м/с) уменьшает мольную долю горючего в смеси (Рис. 3.3(б)) и сдвигает состав

смеси внутрь области воспламенения (Рис. 3.1), т.е. смесь становится взрывоопасной.

Оценка характерного времени конденсации сделана в п. 3.4. Рассмотрена конденсация на поверхности пылевых частиц, всегда присутствующих в атмосфере. Получено, что характерное время конденсации существенно меньше, чем длительность УВ, возникающей при взрыве газового облака размером порядка нескольких метров.

Конденсация паров горючего в ударной волне, распространяющейся по облаку химически инертных микрочастиц рассмотрена в п. 3.5. Показано, что наличие химически инертных микрочастиц достаточно высокой концентрации увеличивает степень переохлаждения, что ведет к конденсации большей массы паров горючего (и, соответственно, большего увеличения мольной доли окислителя в газовой фазе) и уменьшению характерного времени конденсации по сравнению с чисто газовой смесью.

Выводы по Главе 3 сформулированы в п. 3.6.

В Главе 4 (изложение основано на работах [17, 21, 25, 28]): показана принципиальная возможность конденсации паров горючего при адиабатическом сжатии и нагреве газа в пузырьке за фронтом ударной волны, распространяющейся по жидкости (на примере кислородсодержащего пузырька в жидком циклогексане); проанализировано влияние рассматриваемого эффекта на взрывобезопасность; сделана оценка характерного времени конденсации и рассчитаны взрывные пределы пузырька.

Во Введении (п. 4.1) на основе стандартных формул адиабатического сжатия газа с постоянным показателем адиабаты показано, что, как и в случае конденсации за фронтом УВ в газе (Глава 3), возможность конденсации паров горючего при адиабатическом сжатии и нагреве пузырька связана с условием: $\gamma \approx 1$ (при этом второй процесс обратим, а первый – нет). При $\gamma \rightarrow 1$ рост температуры T стремится к нулю, т.к. $T \sim \rho^{(\gamma-1)}$, ρ – плотность, и, соответственно, давление насыщенных паров горючего P_{sat}^f остается постоянным. В то же время давление P и парциальное давление паров P^f растут, т.к. $P \sim \rho^\gamma$. Следовательно, если начальные значения P_{sat}^f и P^f равны, в результате сжатия имеем $P_{sat}^f > P^f$, и конденсация возможна. Замечания о влиянии конденсации на взрывобезопасность, приведенные в Главе 3 (см. комментарии к Рис. 3.1), относятся и к конденсации паров горючего в пузырьке.

В п. 4.2 разработанная в Главе 2 модель взрыва пузырька модифицирована с целью учета конденсации паров, скорость которой полагалась бесконечной. В п. 4.3 и п. 4.4 приведен расчет ударно-волновой динамики и взрыва пузырька без и с учетом конденсации паров. Результаты расчета взрыва пузырька с учетом конденсации приведены на Рис. 4.1; газ состоит из O_2 и насыщенных паров C_6H_{12} , индекс “0” соответствует начальному состоянию,

α^f - мольная доля горючего в газе (α_0^f не меньше ВКПВ), R – радиус пузырька, P – давление газа, $P_0 = 0.1$ МПа, амплитуда УВ $P_{shock} = 1$ МПа. В конце периода индукции состав смещен в область воспламенения (Рис. 4.1а), температура газа превышает температуру самовоспламенения и происходит мгновенный взрыв (Рис. 4.1б). Сдвиг химического равновесия описывался по предложенной в Главе 1 модели для газовой смеси.

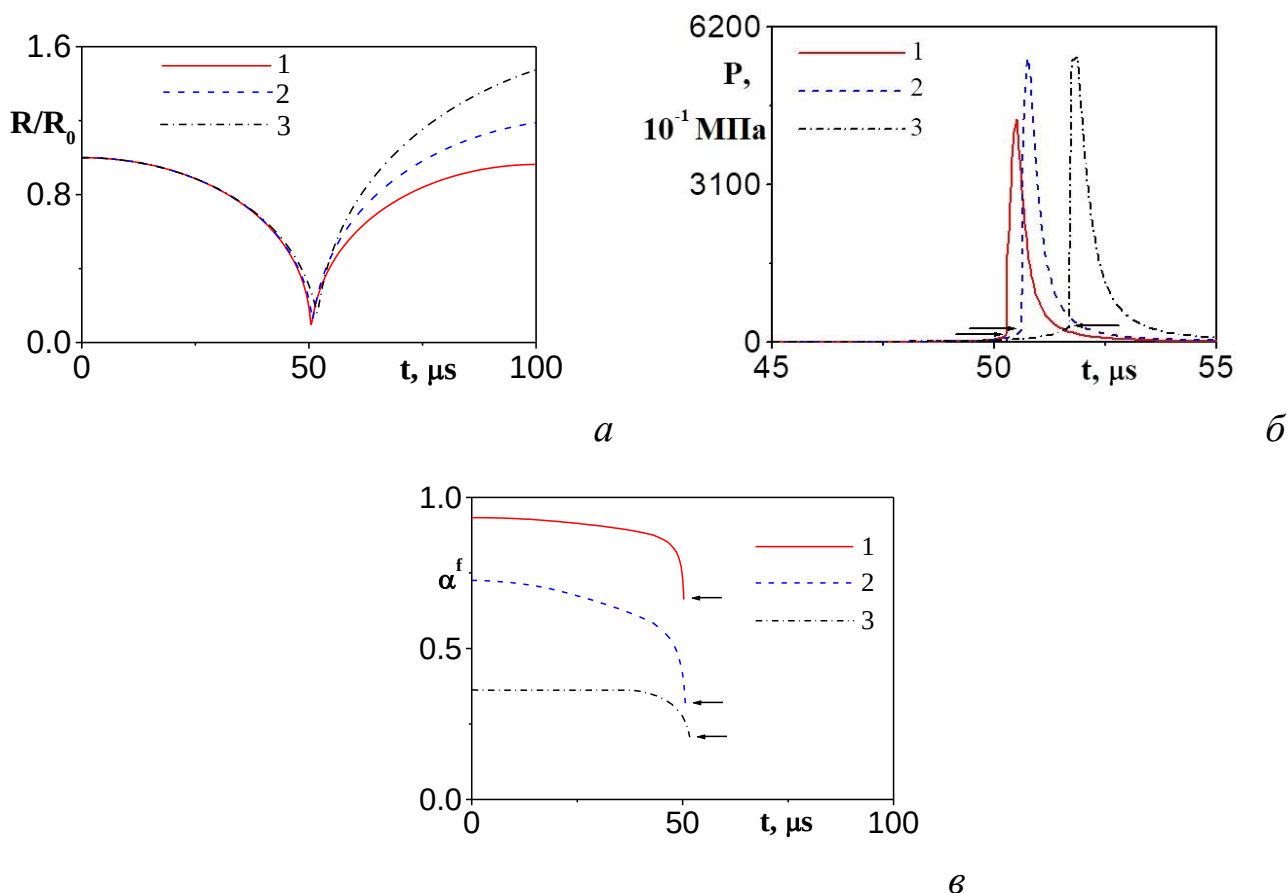


Рис. 4.1. Результаты расчета динамики и взрыва пузырька при конденсации паров. Стрелочки показывают параметры перед взрывом. 1: $\alpha_0^f = 0.933$, $T_0 = 351$ К; 2: $\alpha_0^f = 0.725$, $T_0 = 343$ К; 3: $\alpha_0^f = 0.363$, $T_0 = 323$ К.

Расчет взрывных пределов кислородсодержащего пузырька в жидком циклогексане в координатах начальное давление P_0 – начальная температура T_0 , представлен в п. 4.5. Он выполнен как без, так и с учетом конденсации (Рис. 4.2).

Результаты расчета для амплитуды УВ в жидкости $P_{shock} = 40$ атм представлены на Рис. 4.2а, начальный радиус пузырька $R_0 = 1.85$ мм, пары C_6H_{12} до прихода УВ насыщены. Области ниже кривой 2 (расчет без учета конденсации) и левее кривой 3 (расчет с учетом конденсации) взрывоопасны. Таким образом, конденсация расширяет область давлений и температур, соответствующих взрыву. На Рис. 4.2б представлены расчеты взрывных

пределов для различных амплитуд УВ. Области, расположенные левее соответствующих кривых, взрывоопасны. Видно, что при увеличении амплитуды УВ область давлений и температур, соответствующих взрыву, также расширяется.

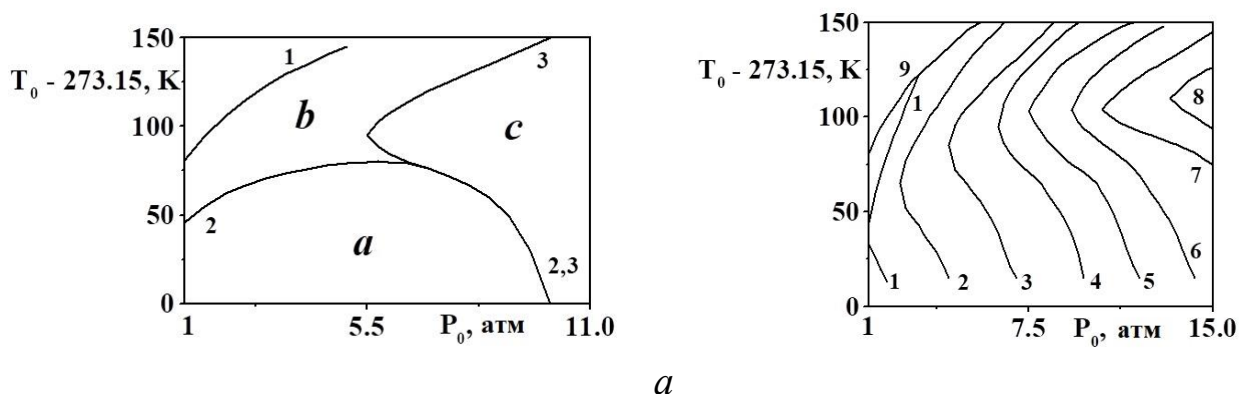


Рис. 4.2. Расчет взрывных пределов пузырька. *а*: 1 – $P_{sat}^{C_6H_{12}}$, 2 и 3 – взрывные пределы; *а* – взрыв, *б* – взрыв/нет взрыва, *с* – нет взрыва. *б*: 1-8 – взрывные пределы для $P_{shock} = 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70$ и 80 атм; 9 – $P_{sat}^{C_6H_{12}}$.

Оценка характерного времени конденсации представлена в п. 4.6. Рассмотрена конденсация паров на поверхности микрокапель, диспергируемых в газ. Получено, что скорость конденсации существенно изменит химический состав газа за время первой пульсации пузырька.

Выводы по Главе 4 сформулированы в п. 4.7.

В Главе 5 рассмотрен вопрос об ослаблении и подавлении волны газовой детонации химически инертными микрочастицами (изложение основано на публикациях [19, 20, 22, 23, 30, 32]).

Во Введении (п. 5.1) сделан обзор соответствующей литературы и сформулированы задачи, решаемые в данной Главе. В п. 5.2 предложен алгоритм расчета параметров ДВ Ч.-Ж. в смеси газа с химически инертными частицами. Принималось, что частицы находятся в механическом и тепловом равновесии с газом (микрочастицы), а в плоскости Ч. – Ж. газ находится в состоянии химического равновесия, которое описывалось по предложенной в Главе 1 модели для газопылевой смеси. Результаты расчета параметров волны, сделанного по предложенному алгоритму, представлены в п. 5.3. Рассчитаны параметры ДВ в водородо-, циклогексано- и метановых смесях с окислителем и частицами SiO_2 , Al_2O_3 , W , WC и KCl (частицы перечислены в порядке убывания теплоемкости, все они полагаются химически инертными). Чем выше теплоемкость частиц, тем ниже скорость волны, давление и температура за передним ударным фронтом и в плоскости Ч.-Ж. Характерные результаты расчета представлены на Рис. 5.1, α – массовая доля частиц, смесь $CH_4 + 2O_2 + N_2$ при нормальных начальных условиях.

Алгоритм оценки размера ячейки ДВ в смеси газа с микрочастицами и соответствующие расчеты для смесей вида H_2/O_2 и $CH_4/O_2/N_2$ представлены в

п. 5.4. Для оценки использована аналитическая формула, аналогичная известной формуле Васильева-Николаева для газа. В п. 5.5 описаны критерии подавления волны, которые использованы в диссертации для расчета минимальной массовой доли конденсированной фазы ρ_c , при которой распространение волны становится невозможным. К ним относятся такие известные критерии, как равенство температуры самовоспламенения газовой фазы и температуры за передним ударным фронтом и уменьшение расчетного значения скорости волны до критически низких значений. Предложен и новый критерий подавления, основанный (по аналогии с детонацией в газах) на сравнении размера ячейки и диаметра канала.

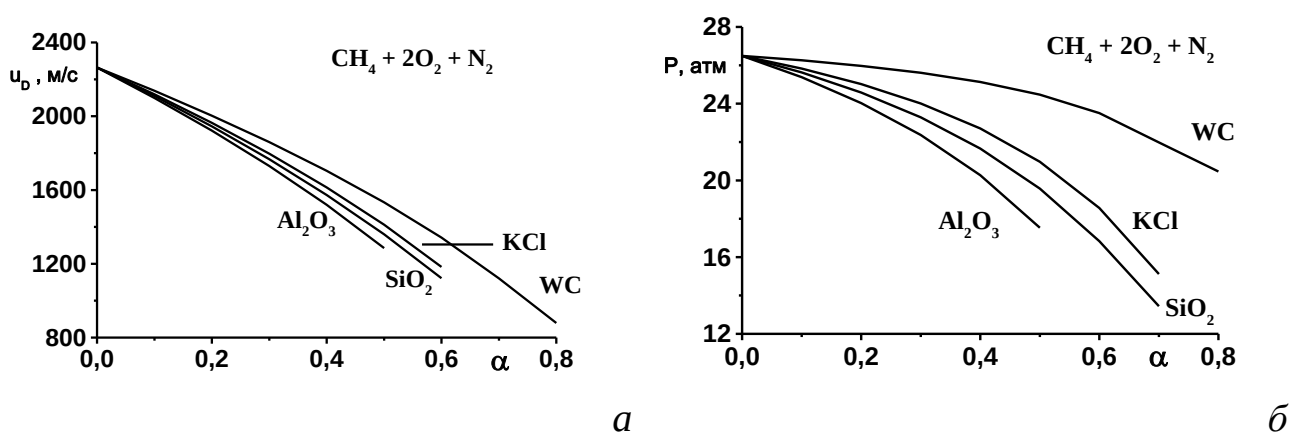


Рис. 5.1. Зависимость параметров ДВ в газопылевой смеси от массовой доли α химически инертной конденсированной фазы; u_D - скорость волны (а), P - давление газа в плоскости Ч.-Ж. (б).

В п. 5.6 проведен сравнительный анализ критериев подавления на основе сравнения результатов расчета ρ_c с экспериментом. Рассмотрены как атмосферные, так и пониженные начальные давления. Рассчитана область существования ДВ в координатах: концентрация горючего в газе – массовая доля частиц в двухфазной смеси. Рассмотрен вопрос о влиянии термодинамических параметров частиц на ослабление и подавление ДВ. Чем выше теплоемкость твердой фазы (а при наличии плавления – и теплота ее фазового перехода), тем эффективнее частицы ослабляют и подавляют ДВ. Данный вывод соответствует эксперименту. В п. 5.7 представлено обобщение предложенного в п. 5.2 алгоритма расчета параметров волны Ч.-Ж. в газопылевой смеси на смеси взрывчатого газа с химически инертными микрочастицами и частицами угля. Полагалось, что частицы угля полностью выгорают в зоне реакции ДВ. В п. 5.8 предложен алгоритм и рассчитаны параметры $D \rightarrow D$ отражения ДВ в рассматриваемой газопылевой смеси от жесткой стенки на примере стехиометрической смеси циклогексана с кислородом и микрочастиц SiO_2 .

Выводы по Главе 5 сформулированы в п. 5.9.

Заключение

1. Разработана обобщенная модель химического равновесия в газовых углеводородо-кислородных смесях. Она содержит явные алгебраические формулы для расчета термодинамических параметров смеси и дифференциальное уравнение для расчета адиабатической кривой. Модель проста, физически обоснована, соответствует принципу Ле Шателье. Высокая точность модели продемонстрирована на расчетах химического равновесия и параметров детонационных волн.

Получена явная алгебраическая формула для оценки характерного времени восстановления химического равновесия в водородо-кислородных газовых смесях.

2. Разработаны обобщенные модели химического равновесия в гетерогенных газопылевых смесях с химически инертной твердой компонентой и газожидкостных смесях при наличии межфазного массообмена. Использование моделей в расчетах взрывных и детонационных течений в газокапельных, газопленочных и пузырьковых смесях и ослабления волны газовой детонации химически инертными микрочастицами показало их хорошую точность и позволило получить новые физические результаты по механизму распространения, структуре и области существования детонационных волн.

3. Предложены обобщенные двустадийные модели химической кинетики детонационного сгорания метана, водородо-кислородной смеси с добавкой монотоплива (перекиси водорода), индивидуального углеводородного горючего произвольного состава и смесей двух и более горючих, которые могут содержать водород, окись углерода, метан и углеводороды произвольного состава. Модели просты, физически обоснованы, позволяют описывать и химическое превращение, и состояние химического равновесия, соответствуют принципу Ле Шателье и второму началу термодинамики, подгоночные коэффициенты отсутствуют. Высокая точность и эффективность моделей для метана, монотоплива и бинарной смеси синтез-газа подтверждена практикой численных двумерных расчетов параметров и многофронтной структуры детонационной волны.

4. Разработана модель стационарной детонационной волны в газокапельной среде, учитывающая сдвиг химического равновесия при наличии межфазного массообмена. Показано, что внутри зоны реакции волны в около-стехиометрических водородно- и углеводородно-кислородных смесях удельный тепловой эффект и молярная масса газа существенно непостоянны. Результаты расчетов параметров волны находятся в хорошем соответствии с экспериментом.

5. Предложена модель стационарной детонации в системе газ-пленка, учитывающая непостоянство термодинамических параметров по сечению трубы, сдвиг химического равновесия и наличие сажи в продуктах реакции. Показано, что в плоскости Чепмена-Жуге молярная масса газа меняется по сечению трубы на порядок, а в области с поперечным размером порядка одной десятой радиуса трубы вблизи поверхности пленки присутствует сажа. Результаты расчетов параметров и структуры волны удовлетворительно соответствуют экспериментальным данным.

6. Зарегистрирован процесс инициирования взрыва химически активных пузырьков преломленными в них вторичными ударными волнами, порожденными взрывами соседних пузырьков. Необходимым условием такого инициирования является предварительное сжатие пузырьков в первичной ударной волне, приводящее часть из них к взрыву.

7. В рамках моделирования ударно-волновой динамики и взрыва одиночных пузырьков и волны пузырьковой детонации предложен алгоритм учета влияния межфазного массообмена на термодинамические параметры смеси, сдвига химического равновесия и возможного наличия микрочастиц сажи в продуктах химической реакции. Это позволило рассмотреть как водородо- и углеводородо-кислородные Системы, в которых горючее и окислитель находятся в одной (газовой) фазе, так и (впервые) Системы, в которых горючее и окислитель находятся в разных фазах, гибридные углеводородо-кислородные Системы и пузырьковые Системы на основе жидких монотоплив. Предлагаемый подход успешно верифицирован на расчетах взрывов одиночных пузырьков, параметров и пределов пузырьковой детонации.

8. Показана не известная ранее возможность распространения волны пузырьковой детонации со сверхзвуковой (относительно “замороженной” по физическим процессам скорости звука) скоростью при достаточно больших начальных давлениях в пузырьковой смеси. Предвестник в такой волне отсутствует, а давление на ее переднем фронте испытывает скачок.

9. Предложена концепция акустического аналога лазерных систем (акустического “лазера”) на основе многократного прохождения детонационной волны по пузырьковой смеси на основе жидкого монотоплива.

10. Показана принципиальная возможность конденсации паров за фронтом ударной волны, распространяющейся по газовой смеси (на примере паров циклогексана, смешанных с окислителем). Конденсация приводит к изменению химического состава газа, уменьшая мольную долю горючего. В результате сильно переобогащенные парами (и потому изначально негорючие)

смеси, могут, тем не менее, взрываться, если конденсация сдвинет химический состав смеси в область воспламенения.

Сделана оценка характерного времени конденсации. Показано, что оно существенно меньше, чем длительность ударной волны, возникающей при взрыве газового облака или разрыве реактора высокого давления, имеющих характерный размер порядка нескольких метров.

Получено, что добавление химически инертных микрочастиц увеличивает степень переохлаждения и массу перешедших в жидкость паров, и уменьшает характерное время конденсации.

11. Показана принципиальная возможность конденсации паров горючего при адиабатическом сжатии и нагреве газа в пузырьке за фронтом ударной волны, распространяющейся по жидкости (на примере кислородсодержащих пузырьков, находящихся в жидком циклогексане).

Конденсация приводит к уменьшению содержания горючего в газовой смеси. Тем самым сильно переобогащенные парами (и потому изначально негорючие) пузырьки могут стать взрывоопасными, если конденсация сдвинет химический состав смеси в область воспламенения.

Сделана оценка характерного времени конденсации. Показано, что конденсация может существенно изменить химический состав газовой смеси за время первой пульсации пузырька.

Показано, что конденсация паров приводит к расширению области взрывных пределов пузырька в координатах: начальное давление – температура.

12. Предложены алгоритмы расчета минимальной концентрации химически инертных микрочастиц, обеспечивающих подавление волны газовой детонации, и предела распространения детонационной волны в зависимости от химического состава газа и концентрации конденсированной фазы в двухфазной смеси. Результаты расчетов удовлетворительно соответствуют эксперименту.

Показано, что ослабление и подавление волны газовой детонации химически инертной пылью более эффективно в случае частиц с высокой теплоемкостью, а при наличии плавления – с большей теплотой фазового перехода.

Список основных публикаций по теме Диссертации

1. Ю.А. Николаев, П.А. Фомин. О расчете равновесных течений химически реагирующих газов // Физика горения и взрыва. – 1982. – Т. 18, № 1. - С. 66-72 (из Перечня ВАК).
2. Ю.А. Николаев, П.А. Фомин. Приближенное уравнение кинетики в гетерогенных системах типа газ - конденсированная фаза // Физика горения и взрыва. – 1983. – Т. 19, № 6. - С. 49-58 (из Перечня ВАК).

3. Ю.А. Николаев, П.А. Фомин. Модель стационарной гетерогенной детонации в газокapельной среде // Физика горения и взрыва. – 1984. – Т. 20, № 4. - С. 97-105 (из Перечня ВАК).
4. П.А. Фомин. Модель стационарной гетерогенной детонации в системе газ-пленка для переобогащенных горючим смесей / П.А. Фомин // Механика быстропротекающих процессов (Динамика сплошной среды). – 1985. - Вып. 73. - С. 122-136 (из Перечня ВАК).
5. А.В. Троцюк, П.А. Фомин. Модель пузырьковой детонации // Физика горения и взрыва. – 1992. – Т. 28, № 4. - С. 129-136 (из Перечня ВАК).
6. П.А. Фомин, А.В. Троцюк. Приближенный расчет изоэнтропы химически равновесного газа // Физика горения и взрыва. – 1995. Т. 31, № 4. - С. 59-62 (из Перечня ВАК).
7. В.К. Кедринский, П.А. Фомин, С.П. Таратута. Динамика одиночного пузырька в жидкости при наличии химических реакций и межфазного тепло-и массообмена // Прикладная механика и техническая физика. – 1999. – Т. 40, № 2. - С. 119-127 (из Перечня ВАК).
8. П.А. Фомин, С.П. Таратута. Расчет области существования самоподдерживающейся волны пузырьковой детонации // Физика горения и взрыва. – 1999. – Т. 35, № 5. - С. 104-106 (из Перечня ВАК).
9. P.A. Fomin, A.A. Vasil'ev. Detonation wave modeling in typical bubble systems // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. – 2001. – V. 14, № 6. - P. 521-526 (из Перечня ВАК).
10. P.A. Fomin, K.S. Mitropetros, H. Hieronymus. Modeling of detonation processes in chemically active bubble systems at normal and elevated initial pressures // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. – 2003. - V. 16, № 4. - P. 323-331 (из Перечня ВАК).
11. K. Mitropetros, P.A. Fomin, J. Steinbach, B. Plewinsky, H. Hieronymus. Explosions of oxygen bubbles in cyclohexane // Chemical Engineering Journal. – 2004. - V. 97, № 2-3. - P. 151-160 (из Перечня ВАК).
12. K. Mitropetros, P.A. Fomin, H. Hieronymus. Safety aspects of a bubbly medium inside a chemical reactor // Chemical Engineering Journal. – 2005. - V. 107, № 1-3. - P. 27-32 (из Перечня ВАК).
13. P.A. Fomin, A.V. Trotsyuk, A.A. Vasil'ev, K. Mitropetros, H. Hieronymus, D. Roekaerts. Model of chemical reaction kinetics for calculating detonation processes in gas and heterogeneous mixtures containing hydrogen peroxide // Combustion Science and Technology. – 2006. - V. 178, № 5. - P. 895-919 (из Перечня ВАК).
14. K. Mitropetros, P.A. Fomin, H. Hieronymus. Behavior of the surface of a bubbly liquid after detonation wave impact // Experiments in Fluids. – 2006. - V. 40, № 3. - P. 431-441 (из Перечня ВАК).

15. K. Mitropetros, P. Fomine, H. Hieronymus. Patent DE 102005015501 B3 2006.11.30. Verfahren und Vorrichtung zur Bestimmung der Zundbedingungen fur ein Gasgemisch. – 2006.
16. I.B. Palymskiy, P.A. Fomin, H. Hieronymus. Rayleigh-Benard convection in a chemical equilibrium gas (simulation of surface detonation wave initiation) // Applied Mathematical Modelling. – 2008. – V. 32, № 5. - P. 660-676 (из Перечня ВАК).
17. P.A. Fomin, J.-R. Chen. Shock induced condensation in a fuel-rich oxygen containing bubble in a flammable liquid // Chemical Engineering Science. – 2008. – V. 63, № 3. - P. 696-710 (из Перечня ВАК).
18. P.A. Fomin, J.-R. Chen. Explosion safety aspects of shock wave-induced condensation in fuel-rich gaseous mixtures // Combustion Science and Technology. – 2008. – V. 180, № 7. – P. 1317-1333 (из Перечня ВАК).
19. P.A. Fomin, J.-R. Chen. Effect of Chemically Inert Particles on Thermodynamic Characteristics and Detonation of a Combustible Gas // Combustion Science and Technology. – 2009. – V. 181, № 8. - P. 1038 – 1064 (из Перечня ВАК).
20. П. А. Фомин, Дж.-Р. Чен. Влияние химически инертных частиц на параметры и подавление детонации в газах // Физика горения и взрыва. – 2009. - Т. 45, № 3. - С. 77-88 (из Перечня ВАК).
21. P.A. Fomin. Mechanism and safety aspects of shock induced explosion of an oxygen containing bubble in a flammable liquids // Theory and Practice of Energetic Materials, Vol. IX, LI Shengcai, NIU Peihuan (Eds.), Science Press, Nanjing, Jiangsu, Beijing, China, 2011. - P. 526-529.
22. А.В. Федоров, П.А. Фомин, В.М. Фомин, Д.А. Тропин, Дж.-Р. Чен. Физико-математическое моделирование подавления детонации облаками мелких частиц. Монография. // Новосибирск: НГАСУ (Сибстрин), Агрос. – 2011. - 156 с.
23. А.В. Федоров, П.А. Фомин, Д.А. Тропин, Дж.-Р. Чен. Моделирование отражения детонационных и ударных волн от жесткой стенки в смесях реагирующего газа с химически инертными частицами // Инженерно-Физический Журнал. – 2012. - Т. 85, № 3. - С. 568-572 (из Перечня ВАК).
24. P.A. Fomin, K.S. Mitropetros. Shock induced ignition of fuel-lean gas bubbles in organic liquids // Transient Combustion and Detonation Phenomena: Fundamentals and Applications (Ed.: G.D. Roy, S.M. Frolov), Moscow, Torus Press. – 2014. - P. 101-112.
25. П.А. Фомин. Моделирование ударно-волнового инициирования взрыва одиночных пузырьков, находящихся в жидких углеводородных горючих // Физика горения и взрыва. – 2014. - Т. 50, № 6. - С. 75-91 (из Перечня ВАК).
26. P.A. Fomin, A.V. Trotsyuk, A.A. Vasil'ev. Approximate model of chemical reaction kinetics for detonation processes in mixture of CH_4 with air //

- Combustion Science and Technology. – 2014. - V. 186, № 10-11. - P. 1716-1735 (из Перечня ВАК).
27. A.V. Trotsyuk, P.A. Fomin, A.A. Vasil'ev. Numerical study of cellular detonation structures of methane mixtures // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. - 2015, V. 36. - P. 394-403 (из Перечня ВАК).
28. А.В. Федоров, Н.Н. Федорова, П.А. Фомин, С.А. Вальгер. Распространение взрывных процессов в неоднородных средах. Монография. Новосибирск: Параллель, 2016, 258 с.
29. П.А. Фомин, А.В. Троцюк, А.А. Васильев. Приведенная модель кинетики детонационного горения метана // Вестник научного центра по безопасности работ в угольной промышленности. - 2016. - № 2. – С. 45-56 (из Перечня ВАК).
30. П.А. Фомин, А.А. Васильев. Ослабление и подавление волны газовой детонации облаком химически инертных микрочастиц // Вестник научного центра по безопасности работ в угольной промышленности. – 2016. - № 2. - С. 63-71 (из Перечня ВАК).
31. P.A. Fomin, A.V. Trotsyuk, A.A. Vasil'ev. Reduced detonation kinetics and detonation structure in one- and multi-fuel gaseous mixtures // Journal of Physics: Conference Series. – 2017. - 894, 012100.
32. А.В. Федоров, Д.А. Тропин, П.А. Фомин, Дж.-Р. Чен. Математическое моделирование детонации в гомогенных и гетерогенных смесях. Монография. Новосибирск: Параллель, 2017, 295 с.
33. P.A. Fomin. Shock Wave Induced Condensation in Fuel-Rich Gaseous and Gas-Particles Mixtures // AIP Conference Proceedings. – 2018. - 1939, 020011.
34. P.A. Fomin. Reduced Chemical Kinetic Model of Detonation Combustion of One- and Multi-Fuel Gaseous Mixtures with Air / P.A. Fomin // AIP Conference Proceedings. – 2018. - 1939, 020012.
35. А.В. Троцюк, П.А. Фомин. Моделирование нерегулярной ячеистой структуры детонационной волны в двухтопливной смеси. // Физика горения и взрыва, 2019, Т. 55, № 4, С. 15-20 (из Перечня ВАК).