УДК 534.222.2

О ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ ТОЛЩИНЕ ЯЧЕИСТОЙ ДЕТОНАЦИИ (ОБЗОР)

Дж. Х. Ли, М. И. Радулеску*

Университет МакГилла, Отдел инженерной механики, H3A2K6 Монреаль, Канада
*Принстонский университет, 08544 Принстон, Нью-Джерси, США, mradules@princeton.edu

Для определения динамических параметров детонации (пределов распространения, энергии прямого инициирования, критического диаметра трубы и т. д.) требуется знание характерного масштаба длины для детонационной волны в направлении ее распространения. Однако большинство процессов детонации неустойчивы, течение в зоне реакции турбулентное и структура потока значительно отличается от идеализированной одномерной модели Зельдовича — Неймана — Дёринга. Показано, что наиболее подходящим масштабом длины для турбулентной детонационной волны является расположение звуковой поверхности, которая отделяет статистически стационарный поток структуры зоны реакции от нестационарного расширения позади волны. Проанализированы предшествующие физические и численные эксперименты с целью определения соотношения между положением средней звуковой поверхности и химическими, механическими и термодинамическими процессами релаксации в детонационной волне. Анализ экспериментальных данных показал, что возможно моделирование структуры турбулентных детонаций в одномерной постановке Зельдовича — Неймана — Дёринга с учетом влияния турбулентности через источниковые члены в уравнениях энергии и импульса. Источниковые члены включают скорости релаксации механических и тепловых флуктуаций и тепловыделения при стремлении системы к равновесию. В рамках идеализированной одномерной структуры с источниковыми членами положение звуковой поверхности определяется балансом между конкурирующими источниковыми членами, удовлетворяющими обобщенному критерию Чепмена — Жуге. Рекомендуется будущие исследования детонации проводить с целью: 1) получения большой экспериментальной базы данных о средних параметрах детонации (скорость детонации, положение звуковой поверхности и средних профилей параметров в зоне реакции), 2) развития (уточнения) соответствующих источниковых членов, учитывающих турбулентные пульсации в осредненных уравнениях движения.

Ключевые слова: детонация, газовая детонация, ячеистая детонация, турбулентность, зона реакции.

ВВЕДЕНИЕ

Исследования последних 50 лет показали, что большинство видов самоподдерживающейся детонации в газообразных взрывчатых смесях неустойчивы. При рассмотрении «головной части» выяснено, что фронт детонации имеет трехмерную неустановившуюся ячеистую структуру. Пример фронтальной ячеистой структуры [1] приведен на рис. 1. Границы ячейки формируются пересечениями поперечных ударных волн с ведущим ударным фронтом. Эти взаимодействия скачков представляют собой трехударные маховские конфигурации. Сдвиговые слои и поперечные скачки простираются от границ ячейки в зону реакции за ведущими скачками. Поперечные скачки охватывают с боков поверхность ударного фронта и сталкиваются друг с другом. Такие отражения скачков заставляют ведущий ударный фронт пульсировать в направлении распространения и изменяться от сильных маховских «ножек» до ослабленных падающих (набегающих) скачков. Между столкновениями поперечных волн скорость ведущего скачка изменяется в диапазоне $1.6 \div 0.7$ от средней скорости. Несмотря на столь большие пульсации, средняя скорость в целом очень близка к скорости Чепмена — Жуге для смесей внутри пределов детонации. Типичная траектория тройных маховских взаимодействий, регистрируемая на закопченную фольгу, представлена на

L. H. Lee, M. I. Radulescu*
Department of Mechanical Engineering, McGill University, H3A2K6 Montreal, Canada.
*Mechanical and Aerospace Engineering, Princeton University, 08544 Princeton, New Jersey, USA.

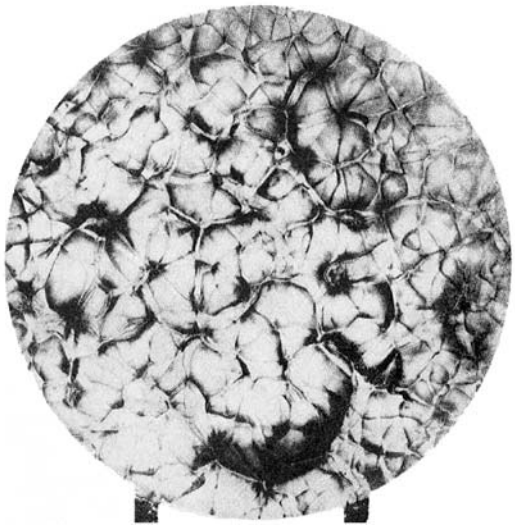


Рис. 1. Следовой отпечаток «головы» ячеистого фронта детонации смеси H_2–O_2(из [1])

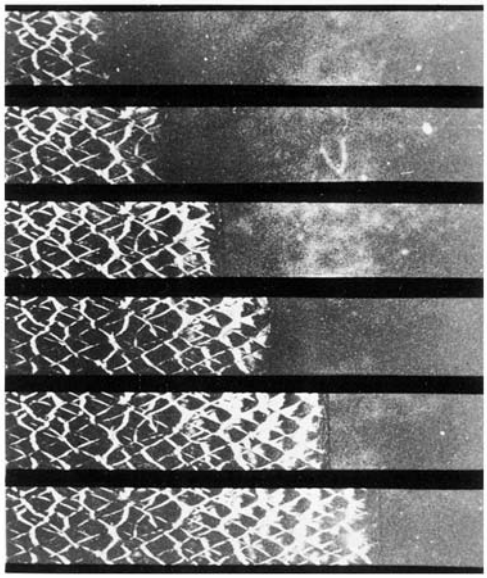


Рис. 2. Шлирен-фотографии и отпечаток детонационной волны на закопченной фольге в процессе «записи на стенке» (из [7])

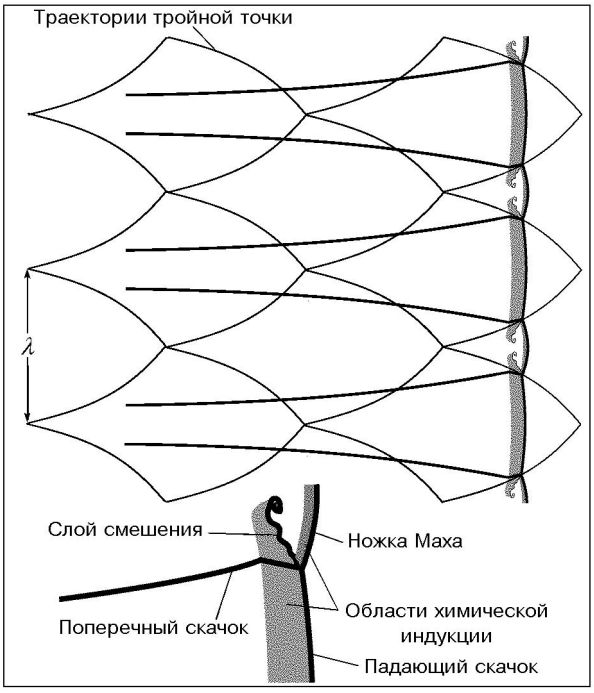


Рис. 3. Схема ячеистой структуры детонации (волна детонации распространяется слева направо)

рис. 2. Схема на рис. 3 иллюстрирует идеализированную структуру ячеистой детонации и показывает мгновенное положение ударного фронта и фронта реакции. Обычно такая идеализированная структура наблюдается только в относительно стабильных ячеистых детонациях. Пример представлен на рис. 4 для газообразной смеси H_2–O_2, разбавленной аргоном. Размер ячейки λ (масштаб поперечных скачков) довольно легко определяется, и структура очень похожа на схему рис. 3. Однако большинство газообразных взрывчатых веществ характеризуется высокой чувствительностью скоростей химической кинетики к локальным термодинамическим состояниям, что делает структуру детонации сильно неустойчивой. На рис. 5 показана шлирен-фотография такой неустойчивой детонации, типичной для большинства топливно-воздушных смесей, представляющих практический интерес. Хорошо видна сильно «турбулентная» природа зоны реакции. Для таких турбулентных ячеистых структур очень трудно определить единственный осредненный, наиболее вероятный или доминирующий размер ячейки. Ясно, что структура такой неустойчивой детонации значительно отличается от классической одномерной ламинарной структуры, постулируемой в модели Зельдовича — Неймана — Дёринга (ЗНД).

Определение динамических параметров детонации [2] (т. е. пределов детонации, критической энергии инициирования, критического диаметра трубы и т. д.) зависит от деталей турбулентной структуры детонации. Использование идеализированной ЗНД-структуры для определения этих динамических параметров

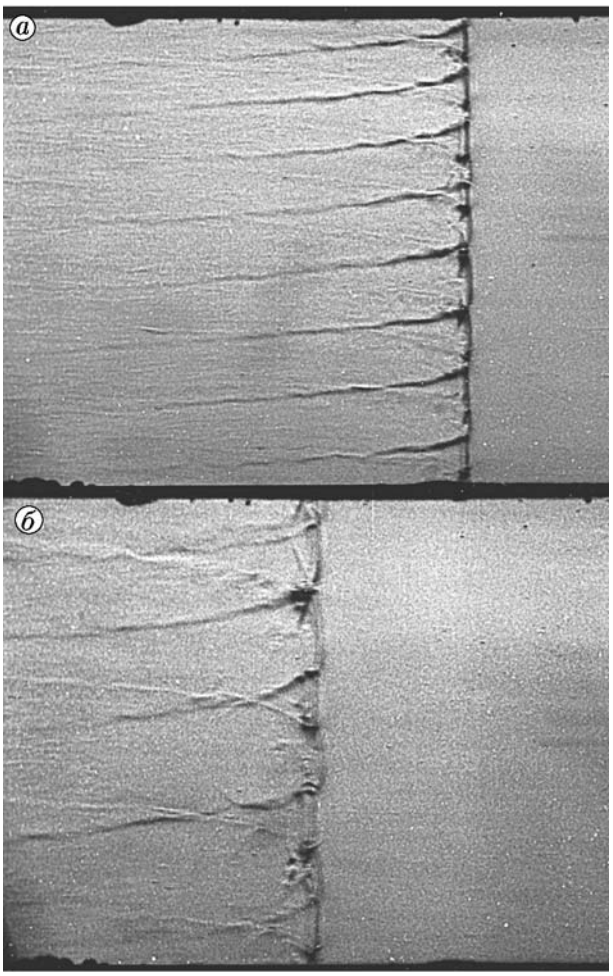


Рис. 4. Шлирен-фотографии детонационной структуры в смеси H_2–O_2–40 % Ar при начальных давлениях 13 (*а*) и 8 кПа (*б*) в канале высотой 10 см и шириной 2.5 см

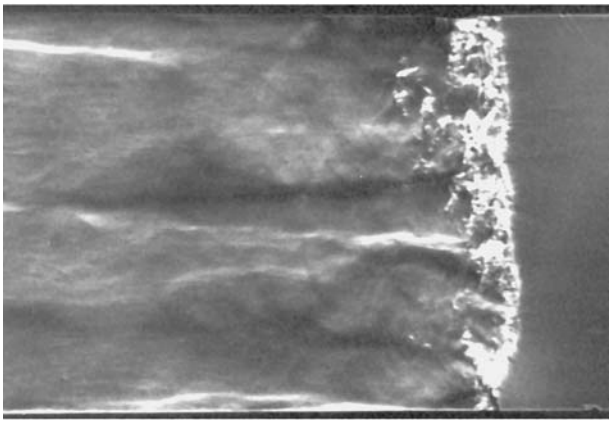


Рис. 5. Шлирен-фотография детонационной структуры в смеси CH_4–$2O_2$ при начальном давлении 10 кПа в канале с поперечным сечением 10 × 2.5 см, размер ячейки ≈5 см

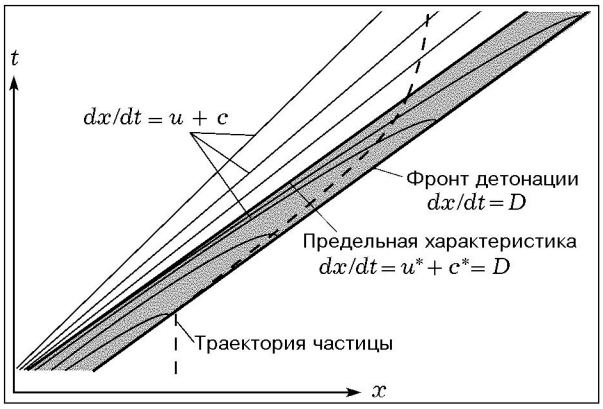


Рис. 6. Диаграмма, иллюстрирующая предельную характеристику на звуковом годографе в системе отсчета, связанной с фронтом детонации

обычно дает неприемлемые результаты. Например, предсказания критической кривизны, основанные на слабо искривленной модели ЗНД, оказались завышенными более чем на порядок по сравнению с экспериментальными пределами [3]. Точно так же дефициты скоростей околопредельных детонационных волн и пределы в гладкостенных трубах систематически были больше, чем предсказанные в соответствии с ламинарной одномерной теорией [3, 4]. Таким образом, ключевая задача исследования детонации — развить модель для ячеистых детонаций, которая позволит определить эти важнейшие неравновесные динамические параметры. Нет необходимости стремиться к полному детальному описанию трехмерной структуры ячеистых детонаций. С точки зрения динамических параметров детонации важен только масштаб длины, поскольку именно он может характеризовать «толщину» ячеистых детонаций (в направлении распространения), как указано в недавней статье [5].

Р. И. Солоухин был первым, кто попытался оценивать соответствующую толщину ячеистой детонации с учетом нестационарных газодинамических процессов, происходящих позади пульсирующего ведущего ударного фронта [6–8]. Он ввел термин «гидродинамическая толщина», чтобы подчеркнуть влияние нестационарных газодинамических процессов расширения на скорость реакций. В последующих исследованиях [9–11] использовалась теория сильного взрыва для моделирования затухания ведущего ударного фронта и анали-

за химических превращений в расширяющемся потоке позади затухающей взрывной волны. Эти ранние попытки показали на качественном уровне, что газодинамическое расширение потока за затухающими скачками увеличивает время индукции на несколько порядков, что приводит к глобальному увеличению протяженности области реакции (намного более длинной, чем за стационарно движущимся скачком в соответствии с предсказанием стационарной модели ЗНД). Оценки сильно зависели от вариации скоростей реакций. Для более неустойчивого процесса детонации оценки времени индукции достигали бесконечных значений для большей части газа, вовлеченного в процессы позади затухающего ударного фронта [9, 12, 13]. Эти наблюдения ведут к заключению, что многомерные эффекты, такие как столкновения поперечных волн и турбулентность, представляют неотъемлемую часть механизма распространения детонации. Как следствие, кажется, что более реалистическая оценка для гидродинамической толщины, основанная на процессе химической релаксации, потребует более детального описания турбулентной зоны реакции. Ввиду сложной турбулентной структуры волны это будет труднодостижимой задачей. Однако, несмотря на сильно нестационарный трехмерный турбулентный характер структуры «реальных детонаций», скорость их распространения оказалась в среднем постоянной и вообще очень близкой к теоретическому значению, определенному из решения стационарных одномерных уравнений сохранения, основанных на критерии Чепмена — Жуге [14]. Для процесса, достаточно удаленного от пределов детонационной способности, в отсутствие граничных воздействий отклонение средней скорости волны от теоретической скорости Чепмена — Жуге незначительно, обычно меньше 2 %. Однако теория Чепмена — Жуге не описывает структуру детонации и только предсказывает состояния равновесия. Из этих наблюдений следует, что теория Чепмена — Жуге должна дать хорошую (первого порядка) аппроксимацию для средних состояний течения, ограничивающих осредненную структуру детонации. Тыл волны должен, следовательно, быть описан, по крайней мере в среднем смысле, предельной характеристической поверхностью, распространяющейся со скоростью $u^* + c^*$, которая должна равняться скорости волны детонации D (т. е. $D = u^* + c^*$, где u^* — массовая скорость, c^* — скорость звука) и отделяет статистически среднюю структуру детонации от любых протяженных неустановившихся волн расширения [15]. Из-за любого неустановившегося расширения волна Тэйлора позади детонации при распространении от закрытого конца трубы [15] не может проникнуть в структуру волны детонации и, следовательно, гарантирует, что волна детонации является самоподдерживающейся со средней постоянной скоростью и расстояние между ударным скачком и предельной характеристической поверхностью должно быть подходящим критерием для толщины волны детонации. Эта предельная характеристика является звуковой плоскостью в системе отсчета, связанной с детонационной волной. Ясно, если u' — скорость материальной точки в этой системе отсчета, т. е. $u' = D - u$, то вдоль этой предельной характеристики скорость потока u'^* будет звуковой (т. е. $u'^* = c^*$). Положение предельной характеристики, отделяющей установившуюся структуру волны детонации от сопровождающих волн расширения, представлено на рис. 6. Динамика мгновенной предельной характеристической поверхности при ее изменении во времени изучалась численно в [16] для одномерных пульсирующих волн детонации. В случае турбулентной детонации, однако, отслеживание локальной динамики характеристической поверхности намного труднее. С этой точки зрения представляет интерес ее среднее положение на некотором расстоянии Δh за осредненным фронтом детонации, которое впредь и будет определять гидродинамическую толщину.

Первая попытка измерить гидродинамическую толщину в ячеистой детонации была сделана в работе [17]. На пути волны детонации ставилась тонкая слабозатупленная выступающая поверхность. При сверхзвуковой скорости локального потока, обтекающего препятствие, что имеет место непосредственно за ведущим ударным фронтом детонационной волны, головная ударная волна остается прижатой к выступу до тех пор, пока поток сверхзвуковой. Когда он становится дозвуковым в системе отсчета, связанной с препятствием (т. е. в лабораторной системе координат), головная ударная волна отделяется от препятствия и распространяется вверх по течению. Наблюдение за головным скачком, следовательно, позволяет определить положение области позади

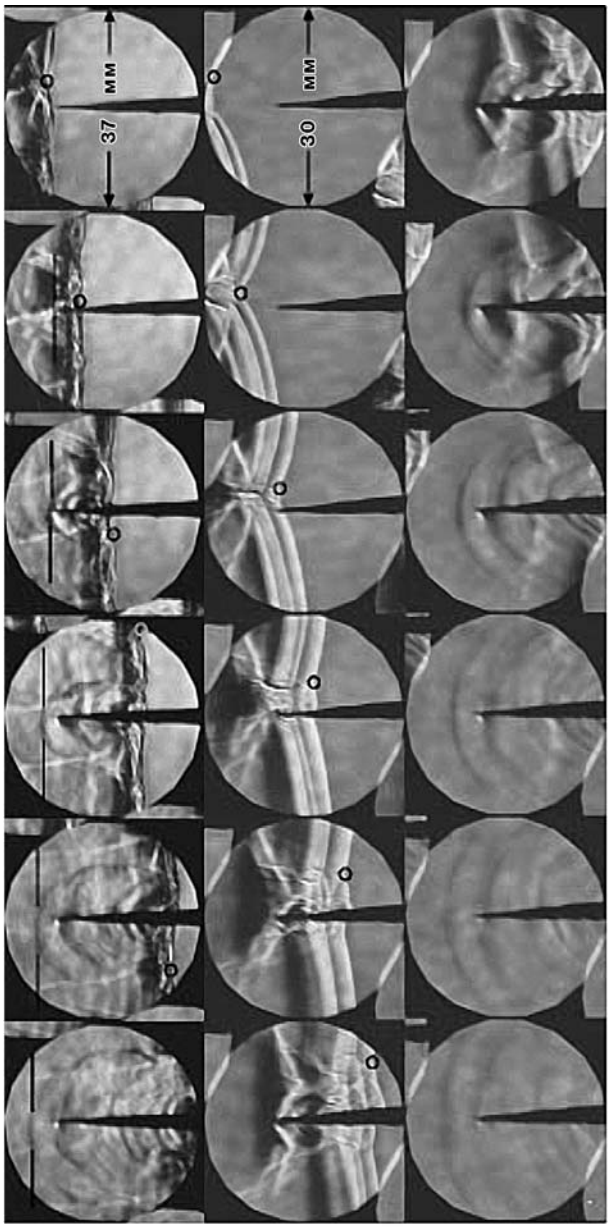


Рис. 7. Взаимодействие волны детонации в смеси H_2–O_2–Ar с препятствием, поясняющее определение звуковой точки в лабораторной системе координат как единственной ее локализации (из [18])

фронта детонации, где поток звуковой в лабораторной системе отсчета. Очень важно подчеркнуть, что положение звукового потока в лабораторной системе координат, т. е. в системе отсчета, связанной с выступающим телом, не соответствует положению звуковой поверхности в системе координат, связанной с фронтом детонации, где она является годографом предельной характеристической поверхности. Например, поскольку в лабораторной системе координат скорость равна $u = D - u'$, то в реальной звуковой плоскости число Маха потока в лабораторных координатах будет $\mathrm{M}^*_{lab} = u^*/c^* = D/c^* - 1$. Легко показать, что M^*_{lab} всегда меньше единицы в реальной звуковой плоскости. Например, если представить волну детонации сильной, то $\mathrm{M}^*_{lab} = 1/\gamma$ в реальной звуковой плоскости (γ — показатель адиабаты). Это означает, что метод [17] всегда занижает истинное положение звуковой поверхности относительно фронта. Однако, поскольку для продуктов горения значение γ в основном близко к единице ($\gamma = 1.1$), этот метод может использоваться как оценка первого порядка нижней границы для определения положения предельной характеристики.

Ясно, что понятие стационарной звуковой плоскости позади неустановившейся турбулентной волны детонации, распространяющейся с некоторой средней постоянной скоростью, является значимым в смысле гидродинамического среднего. В [17] местное число Маха было определено только в единственном положении. Для больших размеров ячейки, сравнимых с размером обтекаемого тела, и в случае больших гидродинамических флуктуаций (см., например, [16]) невозможно обнаружить значимый осредненный одномерный установившийся поток по одной локализации в сильно нестационарной трехмерной области потока. В последующем исследовании [18] использовали набор тонких игл для улучшения процесса осреднения. На рис. 7 и 8 представлены шлиренфотографии с одиночным и наборным препятствиями в потоке. В [18] сообщалось о лучшем определении положения головной ударной волны при использовании набора игл, хотя, как видно на рис. 8, слабый скачок, генерируемый набором игл, четко видимый на кадрах 5–8, далек от плоского и, следовательно, не может обеспечить точного измерения. Измерения положения лабораторной звуковой плоскости, выполненные в [17, 18], различаются в пределах $0.5 \div 3$ ячеек детонации λ от верхнего значения, соответствующего условиям вдали от предельных, когда диаметр трубы превышает несколько характерных размеров ячейки.

Согласно одномерной невязкой теории звуковая поверхность обеспечивает балансировочную точку между установившейся структурой зоны реакции и неустановившимся расширением за волной детонации (см. рис. 6). Эта поверхность отмечена разрывом 1-го рода в тер-

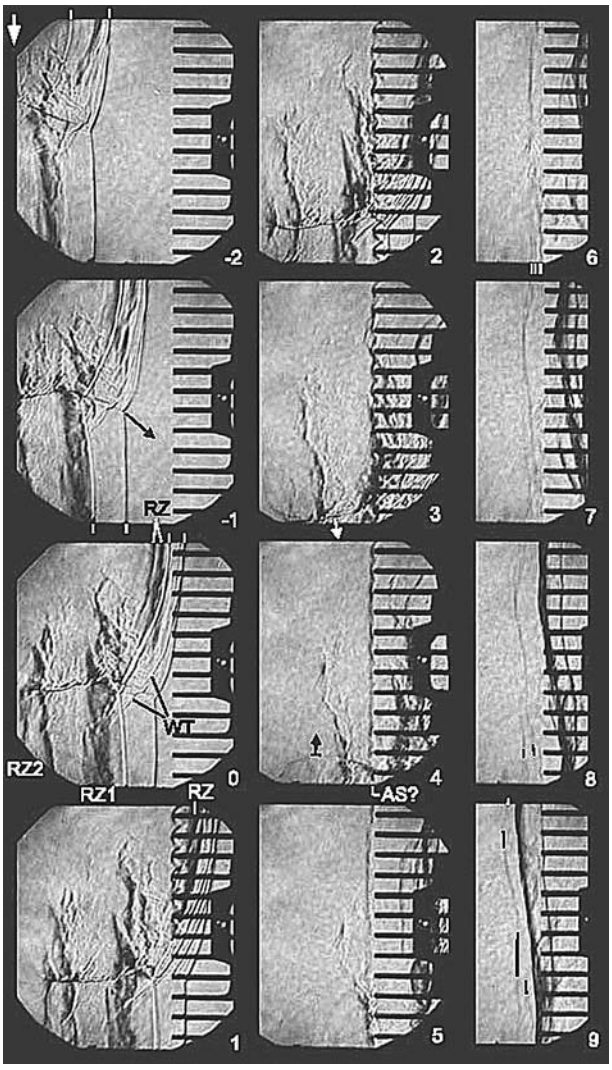


Рис. 8. Взаимодействие волны детонации в смеси с C_2H_2 — воздух с множественными препятствиями, поясняющее влияние трехмерных деталей структуры волны на определение положения звуковой поверхности в лабораторной системе координат (из [18])

модинамических переменных, т. е. разрывом в наклоне. В работе [11] предпринята попытка идентифицировать такое прерывистое поведение из измерений давления в зоне реакции. Однако авторы столкнулись с трудностями из-за больших колебаний давления в зоне реакции. Они оценили положение начала тейлоровской волны приблизительно как $(4 \div 10)\lambda$ ниже по потоку от ведущего фронта и нашли, что этот масштаб длины соответствует ослаблению колебаний давления до незначительного уровня и приближению средних профилей давления к идеальным равновесным значениям теории Чепмена — Жуге. Заметив, что в основном глобальная длина зоны химической реакции (обычно — лишь часть от ширины ячейки λ) намного меньше, чем измеренная гидродинамическая толщина, авторы [11] предположили, что появление звуковой плоскости может быть связано с уравновешиванием механических пульсаций и диссипацией турбулентной энергии в среднюю кинетическую и внутреннюю энергию. Оценки [11] для локализации звуковой поверхности завышены по сравнению с результатами измерений [17, 18], что находится в соответствии с тем, что измерения [17, 18] дают более низкую оценку для положения реальной поверхности Чепмена — Жуге. Однако они хорошо согласуются с более ранними измерениями [8] начала тейлоровского расширения. Результаты работы [8] также показывают, что предельная характеристика расположена приблизительно на расстоянии 4λ вниз по потоку за ведущим фронтом.

Итак, правильное определение положения звуковой поверхности в реальных процессах детонации помогло бы в описании деталей процесса перехода к механическому и тепловому равновесию, которые ведут к утолщению детонационной структуры и существенно влияют на расхождение детонационных динамических параметров с предсказываемыми одномерной теорией [3]. Цель данной статьи — прояснить взаимосвязь между положением звуковой поверхности и глобальными процессами в пределах реальных волн детонации. В § 1 обсуждаются ограничения различных масштабов длины, которые предварительно использовались для характеристики ячеистых волн детонации. В § 2 анализируется ряд численных экспериментов, которые поясняют значение гидродинамической толщины для турбулентной и слабо неустойчивой детонаций. В § 3 сформулирована одномерная модель глобальной осредненной структуры зоны реакции и обсуждается вопрос, как скорости релаксации различных турбулентных процессов управляют гидродинамической толщиной.

1. ХАРАКТЕРНЫЕ МАСШТАБЫ ДЛИНЫ ДЛЯ ТУРБУЛЕНТНОЙ СТРУКТУРЫ ВОЛНЫ ДЕТОНАЦИИ

Согласно классической модели ЗНД структура установившейся ламинарной одномерной

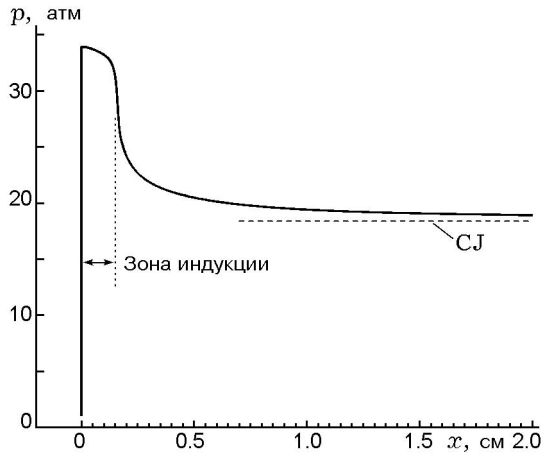


Рис. 9. Профиль давления ЗНД в пропановоздушной смеси детонации при атмосферных начальных условиях

зоны реакции может быть полностью определена, если известны скорости химических реакций. Вместе со скоростью детонации, даваемой равновесной теорией Чепмена — Жуге и состоянием за ведущим скачком как начальным условием, уравнения для скоростей обратимых химических реакций могут быть проинтегрированы совместно с одномерными уравнениями сохранения для движущейся среды вплоть до момента, пока состояние равновесия не достигнуто асимптотически. Пример структуры ЗНД демонстрирует рис. 9, где показан профиль давления при детонации пропановоздушной смеси. Такие профили использовались в прошлом для оценки «длины индукции», или масштаба длины, соответствующего «началу» выделения тепловой энергии и превращению в продукты. За этот масштаб длины обычно принимается расстояние до точки перегиба на профилях, соответствующей максимальной скорости химического энерговыделения. Однако корреляции динамических параметров детонации с длиной индукции оказались не столь успешными, в то время как корреляции с использованием ширины детонационной ячейки были намного лучше [2]. В то же время связь между длиной химической индукции и шириной ячейки λ не очень ясна. Эмпирические соотношения предполагают, что длина индукции может изменяться приблизительно от 0.1λ до 0.01λ для различных взрывчатых смесей [19]. Спорность таких корреляций указывает, что соответствующий масштаб длины для описания структуры детонационной зоны реакции, возможно, должен включать еще и экзотермическую зону реакции и медленную релаксацию химической энергии, что позволило бы использовать его для описания реальной турбулентной детонации. Однако ЗНД-структура зоны реакции не учитывает эти многомерные эффекты в зоне реакции в реальном процессе детонации, которые в значительной мере затрагивают реакции «рекомбинации».

Дальнейшая трудность одномерной модели ЗНД состоит в том, что хотя и можно определять характерный масштаб длины реакции расстоянием, на котором высвобождается «определенная пользователем» доля энергии (скажем, 50 или 90 % от полной энергии), но полное выравнивание достигается лишь асимптотически. В результате звуковая поверхность устанавливается только на бесконечном расстоянии за фронтом, что делает определение положения звуковой поверхности неприменимым исходя из соображений одномерной модели ЗНД с обратимыми реакциями [20, 21]. Математическая трудность определения установившейся звуковой поверхности на конечном расстоянии позади фронта исчезает для общих условий, когда результирующая скорость выделения энергии снижается до нуля на конечной длине от ведущего скачка, перед областью полного равновесия. Так обстоит дело всякий раз, когда скорости вторичных процессов примерно одинаковы. Для некоторых реагирующих смесей (например, H_2–Cl_2) конкуренция экзотермических и эндотермических процессов может привести к нулю результирующую скорость реакции во внутренней точке, перед состоянием полного равновесия химических процессов. В этом так называемом «патологическом» случае [21] звуковая поверхность может установиться на конечном расстоянии позади ведущего фронта, где скорость результирующего энерговыделения будет нулевой. Мы видим, таким образом, что положение звуковой плоскости необязательно совпадает с масштабом длины для химического уравновешивания. Хотя полное равновесие достигается на значительно больших масштабах длины, присутствие звуковой поверхности изолирует установившуюся зону реакции от следующей неустановившейся области потока. При таком сценарии скорость детонации управляется только доступным энерговыделением от скачка до звуковой поверхности. Завершающие химические

реакции проходят за звуковой поверхностью, т. е. вне области влияния ударного фронта. Такой же эффект возможен при действии любого дополнительного конкурирующего процесса релаксации, например, для структуры слабо искривленной детонации [22] или в присутствии трения и потерь энергии [23]. Во всех этих случаях, поскольку энерговыделение и газодинамические процессы вне плоскости Чепмена — Жуге не связаны, масштаб длины, основанный на положении этой плоскости, более значимый параметр, чем масштаб длины, описывающий, как быстро достигается химическое равновесие, или же масштаб длины, описывающий исключительно процесс химической индукции.

Для случая ячеистой детонации задача сильно осложнена присутствием больших гидродинамических флуктуаций. Турбулентные пульсации подобны вкладу части энергии в пределах детонационной структуры, и затухание таких флуктуаций вызывает дополнительный процесс релаксации. Ячеистая динамика также значительно влияет на скорость реакций, следовательно, изменяет глобальную химическую релаксацию. Для ячеистой детонации размер ячейки λ или эквивалентная длина ячейки $L_c = 1.6\lambda$ широко используются как характерный масштаб длины для эмпирического определения динамических параметров [1, 24]. Размер ячейки может быть определен методом закопченных фольг, впервые использованным в работе [25]. Хотя получить отпечаток на закопченной фольге от проходящей детонации довольно легко, оценить один характерный размер ячейки из типичного закопченного отпечатка достаточно трудно. За исключением специальных смесей со слабыми зависимостями скоростей реакций от термодинамических условий (например, сильно разбавленные смеси H_2–O_2 или C_2H_2–O_2 с аргоном), отпечатки ячейки вообще очень нерегулярны и выбор единственного размера ячейки требует субъективного суждения и опыта. Для сильно неустойчивых смесей часто невозможно интерпретировать закопченную фольгу.

Для слабо неустойчивой детонации ячеистый процесс регулярен и повторяется циклически. Воспламенение в основном происходит от ведущего скачка сжатия [26]. Для этого типа слабо неустойчивых смесей длина ячейки и величина пульсаций ведущего скачка могут полностью определять масштаб длины химической релаксации. Например, при использовании методов сильного взрыва прямым моделированием можно выявить связь неустановившейся области потока, управляемой длиной ячейки, и величины пульсаций с результирующими скоростями химических реакций и толщиной волны [10, 11, 27]. Для сильно неустойчивой детонации, однако, размер ячейки имеет совершенно иной смысл. Для таких смесей показано, что механизм воспламенения не связан напрямую с лидирующим ударным сжатием. Поперечные волны сжатия и турбулентность, генерируемая взаимодействием поперечных волн со слоями плотности, позволяет зажечь более половины исследованных газов [9, 13, 28]. Воспламенение, характеризуемое дискретными импульсами давления, ведет к развитию неустойчивости на фронте в виде ячеистой «субструктуры». Для таких неустойчивых процессов ячеистая структура может рассматриваться как конкуренция двух каскадных процессов. Первый — релаксация механических колебаний, обусловленная газодинамическим расширением, и диссипация механических и тепловых флуктуаций через диссипативные механизмы в малых масштабах. Второй — усиление вторичных высокочастотных ячеистых мод, действующих на масштабах длины области экзотермичности и усиливающихся до обычных более сильных детонационных мод [13]. В этих случаях ясно, что концепция размера ячейки должна использоваться в смысле «внешнего масштаба» турбулентного режима, полностью удаленного от синхронного и циклического явления, реализующегося в очень регулярных ячеистых смесях. Этот внешний масштаб управляет частотой взаимодействий между самыми сильными поперечными скачками и зонами реакции и, следовательно, контролирует скорость релаксации турбулентной энергии. Поэтому, возможно, имеется прямая связь между ячеистым внешним масштабом в неустойчивой детонации и глобальной толщиной зоны реакции в процессе неустойчивой детонации.

Резюмируя, можно сказать,что, в принципе, имеется три масштаба длины для процесса неустойчивой детонации: химический масштаб длины, описывающий химическую релаксацию, термодинамический (или механический) масштаб длины, соответствующий релаксации гидродинамических флуктуаций, и положение звуковой поверхности, где среднее число Маха осредненного потока равно еди-

нице. Положение звуковой поверхности существенно для соответствия установившегося потока (средние свойства установившейся детонации в направлении распространения) неустановившемуся потоку в тейлоровской волне позади звуковой плоскости. Кроме того, если установившаяся средняя скорость распространения неустойчивой ячеистой детонации может быть определена, то разумно ожидать четкую локализацию такой звуковой плоскости, отделяющую установившиеся средние свойства детонации от неустановившегося потока расширения в продуктах. Если динамика детонационной волны и структура зависят исключительно от параметров течения до достижения звукового условия, разумно выбрать положение звуковой плоскости как наиболее соответствующий масштаб длины, чтобы характеризовать процесс неустойчивой ячеистой детонации.

2. АНАЛИЗ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В реальном эксперименте чрезвычайно трудно измерить термодинамические и химические параметры в нестационарных трехмерных турбулентных зонах реакции. Однако современные достижения в области численных расчетов позволили выявить детальную структуру ячеистых детонаций при адекватном описании, по крайней мере для двумерного случая. Вообще, эти расчеты основаны на уравнениях Эйлера с реакциями для двумерной плоской геометрии. Достаточно хорошее разрешение также может быть реализовано для воспроизведения мелкомасштабных особенностей турбулентной структуры зоны реакции. В таких расчетах влияние процессов турбулентного перемешивания и диффузии на химические реакции, идущие на самых малых масштабах, явно не учитывается, но предполагается, что оно учтено, по крайней мере качественно, в процессе мелкомасштабной численной диссипации. В первом приближении такие численные расчеты могут удовлетворительно учитывать влияние крупномасштабных нестационарных газодинамических процессов на химические реакции. По этой причине эволюция химических процессов и газодинамических параметров может быть точно определена с целью получения исчерпывающих данных о профилях механической релаксации. Можно провести соответствующее осреднение данных о пространственной и временно́й эволюции химических компонентов, так же как и о термодинамическом состоянии потоковых переменных, и определить затем полную длину химической релаксации и положение звуковой плоскости в направлении распространения.

Такая попытка недавно выполнена в [29]. Были проведены двумерные расчеты с использованием кода μCobra, описанного в [30]. Для простоты использовалась аррениусовская кинетика, реакция полагалась одноступенчатой, газ считался идеальным. Термохимические параметры выбраны такими, чтобы представить два различающихся случая регулярности ячеек. Первый расчет проводился для метанокислородной детонации [13] с эффективной энергией активации $E_a/RT_{VN} = 11$, тепловыделением $Q/RT_{VN} = 7.5$ и показателем изоэнтропы $\gamma = 1.24$, соответствующим значениям $E_a/RT_0 = 64$ и $Q/RT_0 = 43$. Здесь нижние индексы 0 и VN относятся соответственно к начальному состоянию и состоянию Неймана за скачком в модели ЗНД. Из-за сильно неустойчивой природы этого фронта максимальное разрешение в адаптивной сетке усовершенствованного кода было 128 точек на половине длины реакции $\Delta_{1/2}$ установившейся волны (т. е. в точке, где выделилось 50 % энергии). Второй расчет выполнен для слабо неустойчивой детонации с параметрами $E_a/RT_{VN} = 5.6$, $Q/RT_{VN} = 10.4$, $\gamma = 1.2$ ($E_a/RT_0 = 27$, $Q/RT_0 = 50$). Из-за намного более слабого уровня неустойчивости использовалось разрешение 32 точки на $\Delta_{1/2}$. В обоих случаях детонация инициировалась сильной взрывной волной, которая затем ослаблялась до состояния самоподдерживающейся детонационной волны. Вычислительная область простиралась до обратной стенки, где была инициирована детонация, и решена явно как неустановившаяся тейлоровская волна расширения (разрежения) позади фронта детонации. В целях экономии вычислительная ширина области была выбрана такой, чтобы разрешить одномодовую детонацию с единственной тройной точкой. Это соответствовало выбору высоты двумерного канала как $6\Delta_{1/2}$ и $10\Delta_{1/2}$ для случаев соответственно сильно неустойчивой и слабо неустойчивой детонации.

Сильно неустойчивая детонация

На рис. 10 показана нерегулярная структура детонации в моменты, когда основная фронтальная тройная точка движется вниз: по-

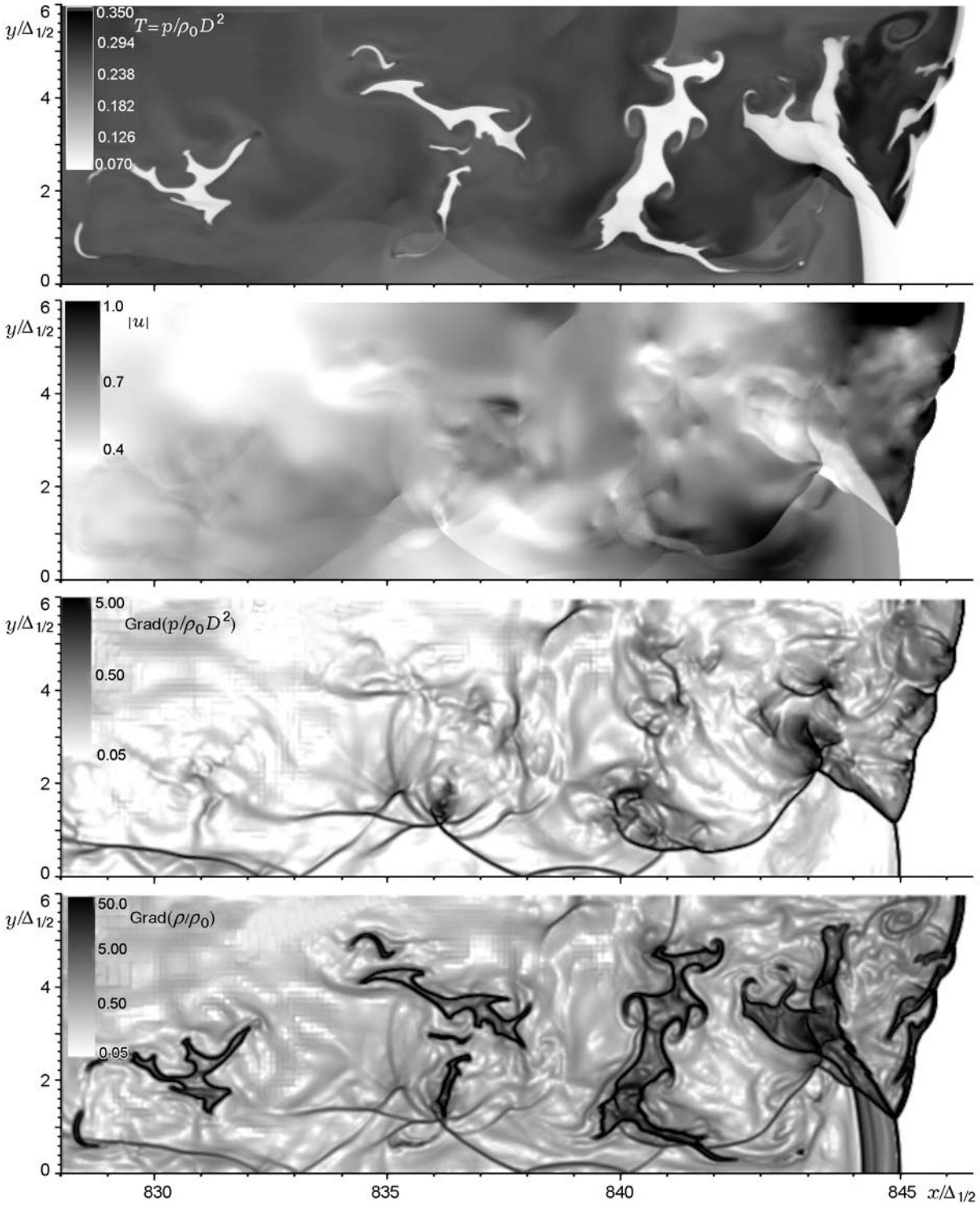
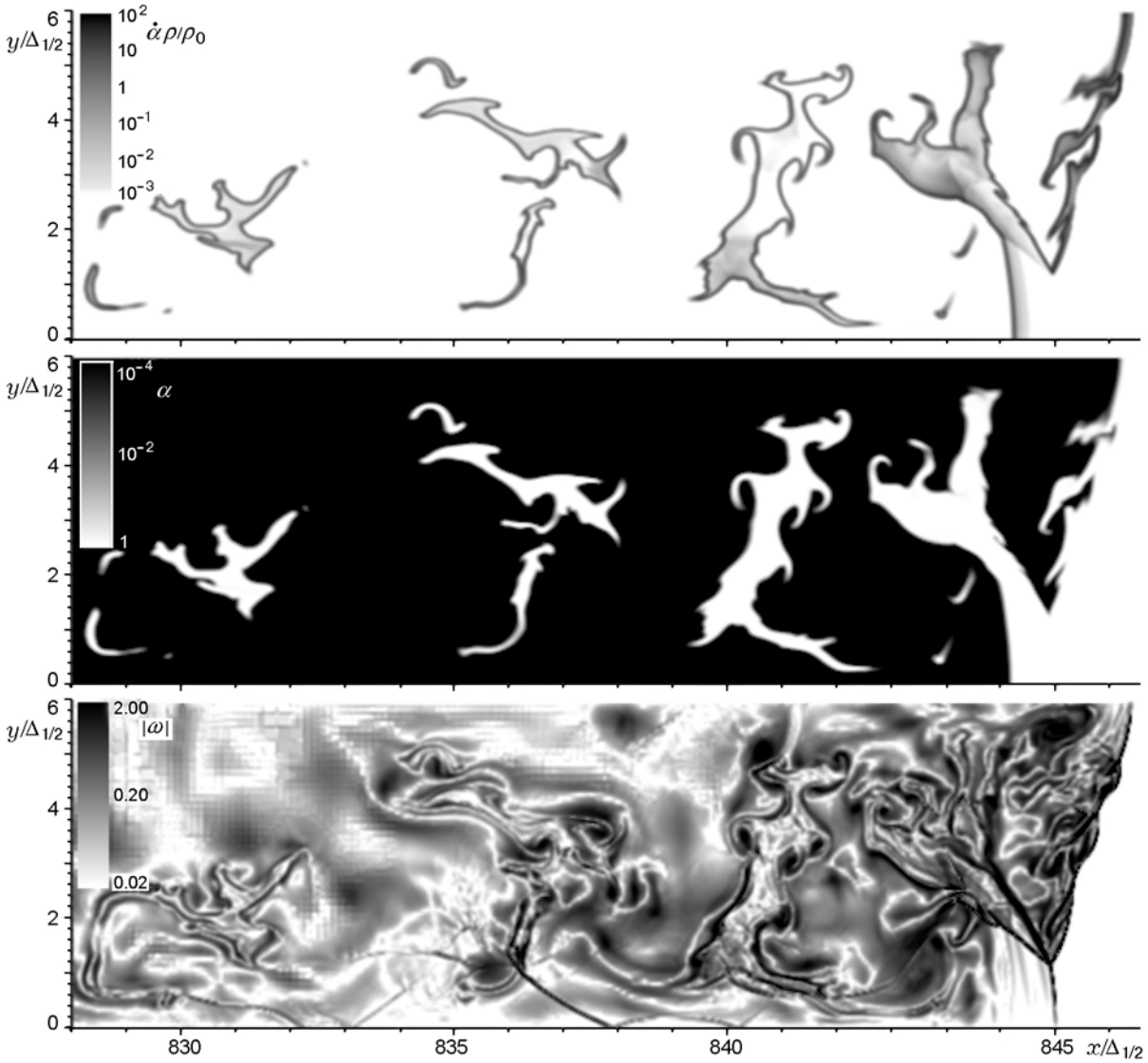


Рис. 10. Мгновенные температура, скорость частицы, градиент давления, градиент плотности, скорость реакции, концентрация реагентов и завихренность для неустойчивой волны детонации ($E_a/RT_0 = 67$)



Продолжение рис. 10

ля температуры, скорости течения, градиента давления, градиента плотности, скорости реакции, концентрации реагентов и завихренность (по оси абсцисс отложено безразмерное расстояние от тыльной стенки, по оси ординат — от нижней стенки). Главная особенность процесса неустойчивой детонации — несгоревшие области («карманы») с конвекционными процессами при их движении вниз по потоку от ведущего фронта и результирующая турбулентная область потока. Карманы образуются из газов, подвергнутых воздействию более слабого начального скачка, за которым времена задержки воспламенения намного больше, чем в газах, подвергнутых воздействию маховской ножки. Из-за дополнительного воздействия волн расширения (разрежения) время индукции в этом газе, сжатом более слабыми фронтальными скачками, приблизительно в 100 раз больше, чем масштаб времени ячеистого цикла. Карманы реагируют на самом маленьком масштабе разрешения численных диффузионных пламен, подобно воздействию реальной диффузии в экспериментах. Тщательное сравнение с экспериментами [13] приводит к заключению, что разрушение карманов турбулентными взаимодействиями обеспечивает перемешивание карманных поверхностей раздела и увеличение пол-

ных скоростей горения.

Интересно заметить, что, хотя расчеты были только двумерными, турбулентная область потока быстро развилась вслед за главным фронтом, несмотря на то, что в двумерном случае не представлен механизм вихревой напряженности, работающий в трехмерной несжимаемой турбулентности и порождающий колмогоровский каскад энергии. Исходя из разумного согласия результатов расчета и экспериментов, можно предложить не включать механизм напряженности вихря в анализ турбулентной области потока. Проанализируем двумерное уравнение завихренности для лагранжевой материальной точки:

$$\frac{D_\omega}{Dt} = \frac{1}{\rho^2}\nabla\rho\cdot\nabla p - w\nabla u + A,$$

где A — вязкие члены. Единственный механизм производства завихренности в двумерной детонации — через бароклинный крутящий момент между неприсоединившимися (независимыми) градиентами давления и плотности. Дивергентный член скорости действует как сток затухающей завихренности при расширении потока. В результате турбулентность в структуре волны детонации обусловлена в основном эффектами сжимаемости среды: завихренность генерируется взаимодействием скачков, которые создают сдвиговый слой, и взаимодействиями скачок — вихрь и скачок — слой плотности. Как видно из рис. 10, высокие уровни производства завихренности соответствуют областям взаимодействия между скачками и большими градиентами плотности, соответствующими фронтам реакции. Обнаруженные в расчетах сдвиговые слои при маховских отражениях подвержены воздействию кельвин-гельмгольцевой неустойчивости. Причем неустойчивость усиливается при прохождении поперечных скачков, которые далее разрушают поверхности раздела плотности и разупорядочивают структуру поперечных скачков. Эта трансформация областей давления и плотности в вихревые ударно-волновые дорожки является следствием особенностей сжимаемой турбулентности. Очевидно, что трехмерный механизм «вытягивания» вихрей и связанный с ним колмогоровский механизм должны играть роль в реальных трехмерных детонациях, приводя в действие меньшие масштабы, пока не начинает играть роль демпфирование процесса за счет молекулярного переноса. Чтобы решить этот вопрос, необходимо сравнение результатов двумерного и трехмерного расчетов, которые позволяют определить масштабы турбулентности.

Хотя рассчитанная интенсивность турбулентности не столь высока, как в экспериментах, из-за ограничений в численном разрешении результаты этих расчетов можно использовать для того, чтобы качественно рассмотреть глобальную структуру фронта и положение звуковой поверхности, которая следует из крупномасштабной турбулентной структуры. Осредненная структура зоны реакции была получена осреднением по Фавру [31]. В осреднении по Фавру используется средневзвешенная локальная плотность для определения плотности (и импульса, и плотности энергии) в различные моменты времени и при различных положениях в пространстве. Осреднение по Фавру в системе отсчета среднего движения детонации представляет стремление к средним свойствам многих статистически подобных лагранжевых элементов среды, пересекающих структуру волны детонации. Временно́е осреднение выполнялось в системе отсчета, перемещающейся со средней скоростью волны детонации. Скорость волны детонации была определена в шести полных ячеистых циклах и оказалась на 1 % меньше, чем идеальная скорость Чепмена — Жуге, хотя из-за больших пульсаций ведущего скачка достоверный уровень составлял приблизительно 1 %. Среднее давление, плотность, концентрация реагентов α ($\alpha = 1$ в нереагирующем газе, $\alpha = 0$ в полностью прореагировавшем газе) и число Маха приведены на рис. 11 наряду с идеальными профилями стационарной структуры ЗНД. Диаграмма Гюгонио, представляющая путь средней лагранжевой частицы в плоскости p–v, показана на рис. 12. Из-за турбулентного характера фронта состояние частицы значительно отличается от идеальной линии Рэлея, определяемой одномерным законом сохранения импульса. Ясно, что это предполагает больший вклад механических флуктуаций в законе сохранения осредненного импульса. Поскольку структура головного фронта волны сильно нестационарна, глобальная скорость химических реакций также существенно занижена по сравнению с идеальной волной и реагенты полностью взаимодействуют на расстоянии больше $\approx 30\Delta_{1/2}$. Заметим, что за зоной реакции давление и плотность приближают-

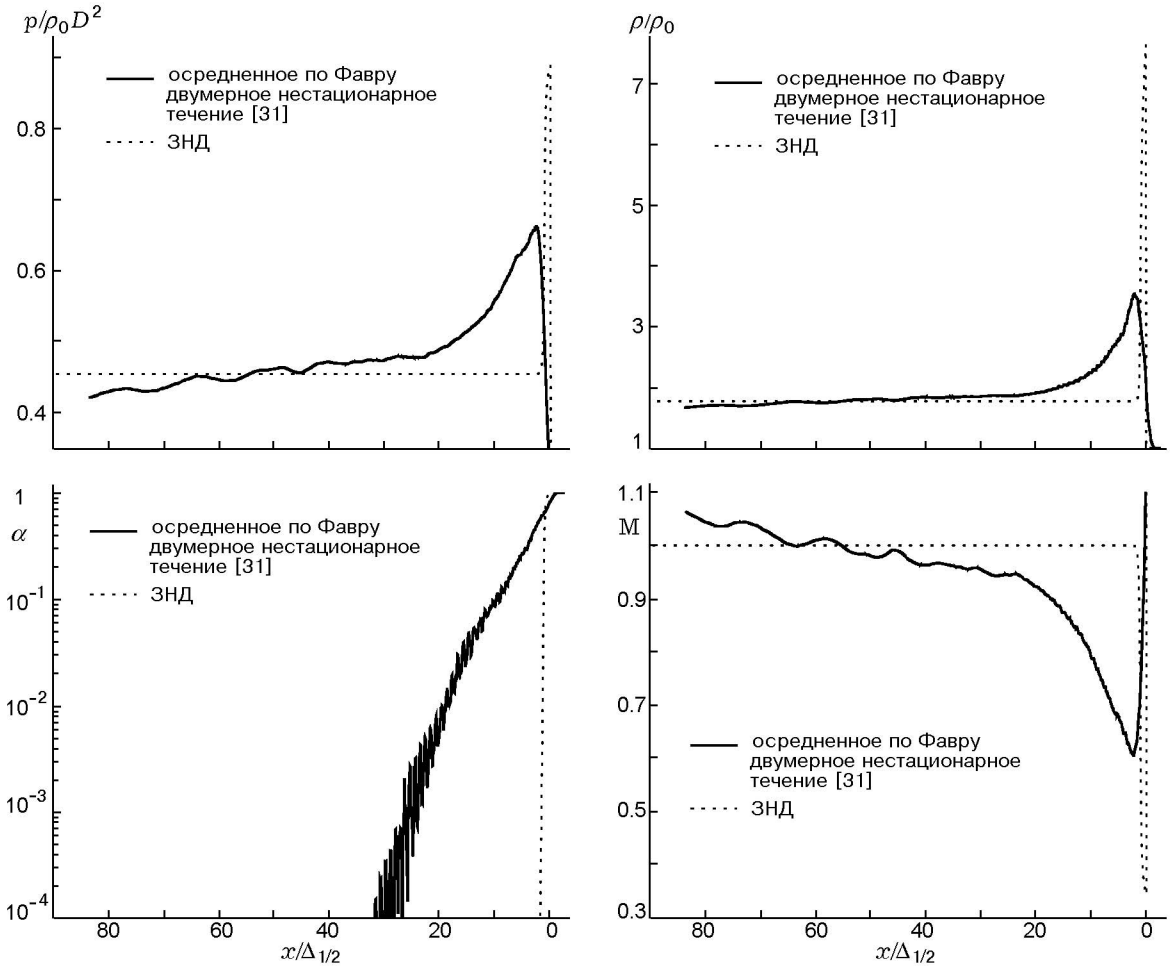


Рис. 11. Осредненные по Фавру [31] профили давления, плотности, концентрации реагентов и числа Маха для сильно неустойчивой волны детонации (для сравнения показаны профили ЗНД)

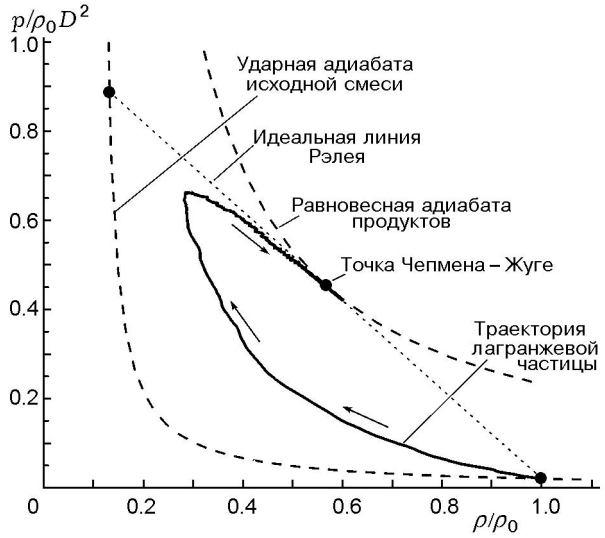


Рис. 12. Траектория средней лагранжевой частицы в структуре волны детонации

ся к идеальным значениям Чепмена — Жуге, задаваемым состоянием полного равновесия на расстоянии $\approx 50\Delta_{1/2}$. Интересно, что этот масштаб длины также соответствует точке, где средняя звуковая поверхность «развита» и число Маха в системе отсчета волны детонации равно единице. Также интересно отметить, что локализация звуковой поверхности соответствует величине $\approx 4\lambda$, что соразмерно с экспериментальными наблюдениями [11] и [8]. Правда, не очень ясно, случайно ли такое совпадение, ввиду недостатков существующей модели (двумерность, упрощенная аппроксимация диссипативных процессов).

Вызывает интерес тот факт, что звуковая поверхность расположена дальше зоны химической релаксации. Это предполагает, что влияние флуктуаций давления и скорости может свидетельствовать в пользу интерпрета-

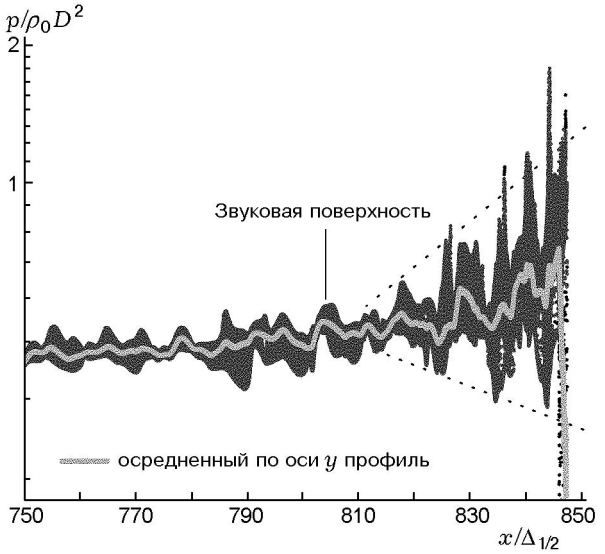


Рис. 13. Флуктуации давления для процесса детонации, приведенного на рис. 10

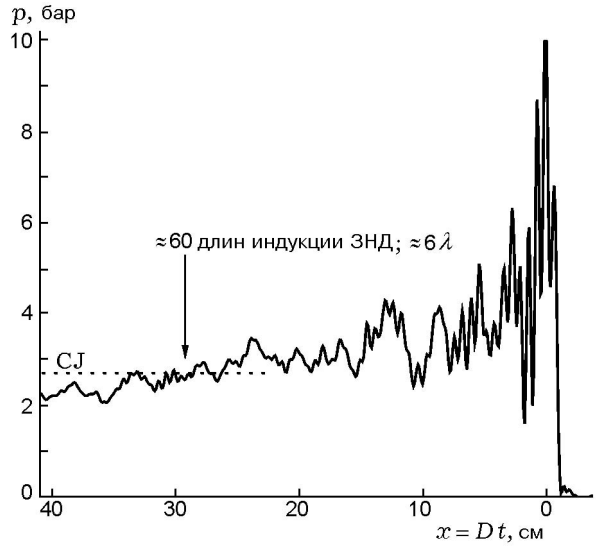


Рис. 14. Запись давлений, измеренных при детонации смесей CH_4–$2O_2$

ции Эдвардсом его экспериментальных результатов [11]. К сожалению, большая стохастичность в области течения не позволяет достаточно точно определить значения пульсационных параметров. Это требует долговременного осреднения для получения статистически сходимых решений для флуктуирующих величин более высокого порядка. Качественная картина пульсаций показана на рис. 13, где реализуемые давления на целой вычислительной области в один из моментов представлены только как функция расстояния x (соответствует такому же кадру на рис. 10). Ослабление флуктуаций давления большой амплитуды, по-видимому, приближенно коррелирует с положением звуковой поверхности.

В экспериментах [29] измеряли спад давления позади детонации в смесях CH_4–O_2, т. е. при тех же самых условиях, что и в численном эксперименте, обсуждаемом здесь. Подобно численным результатам, в экспериментах [29] обнаружено, что среднее давление снижается к значению, близкому к идеальному значению Чепмена — Жуге на расстояниях, намного больших, чем заметный экзотермический слой, наблюдаемый на шлирен-фотографиях (см., например, рис. 5). На рис. 14 показан пример измеренного профиля давления. Релаксация среднего давления к значению, близкому к значению Чепмена — Жуге, достигнута на расстоянии ≈30 см позади фронта, или ≈60 длин индукции в теории ЗНД, что также соответствует расстоянию приблизительно 6λ для этой смеси. Напротив, толщина «неоднородной» области во фронте, полученная из шлирен-фотографий (см. рис. 5) и соответствующая большим градиентам плотности на границах раздела непрореагировавших карманов, меньше 2 см, т. е. 4 длин индукции в теории ЗНД, или меньше половины ширины ячейки. В заключение скажем, что результаты экспериментов и численных расчетов свидетельствуют в пользу того, что для этого типа сильно неустойчивых детонаций появление звуковой поверхности больше связано с релаксацией механических колебаний, чем с величиной глобального «индукционного» слоя, видного на шлирен-фотографиях, что можно по неосторожности ошибочно принимать за масштаб длины полной тепловой релаксации.

Слабо неустойчивая детонация

На рис. 15 показаны температура, градиент давления, концентрация реагентов и завихренность в процессе слабо неустойчивой детонации в том же масштабе, что и для случая сильно неустойчивой детонации. Ясно, что большинство реакций происходит непосредственно вблизи фронта и структура намного менее турбулентна, чем для действительно неустойчивых детонаций, показанных на рис. 11. Средняя скорость детонации, рас-

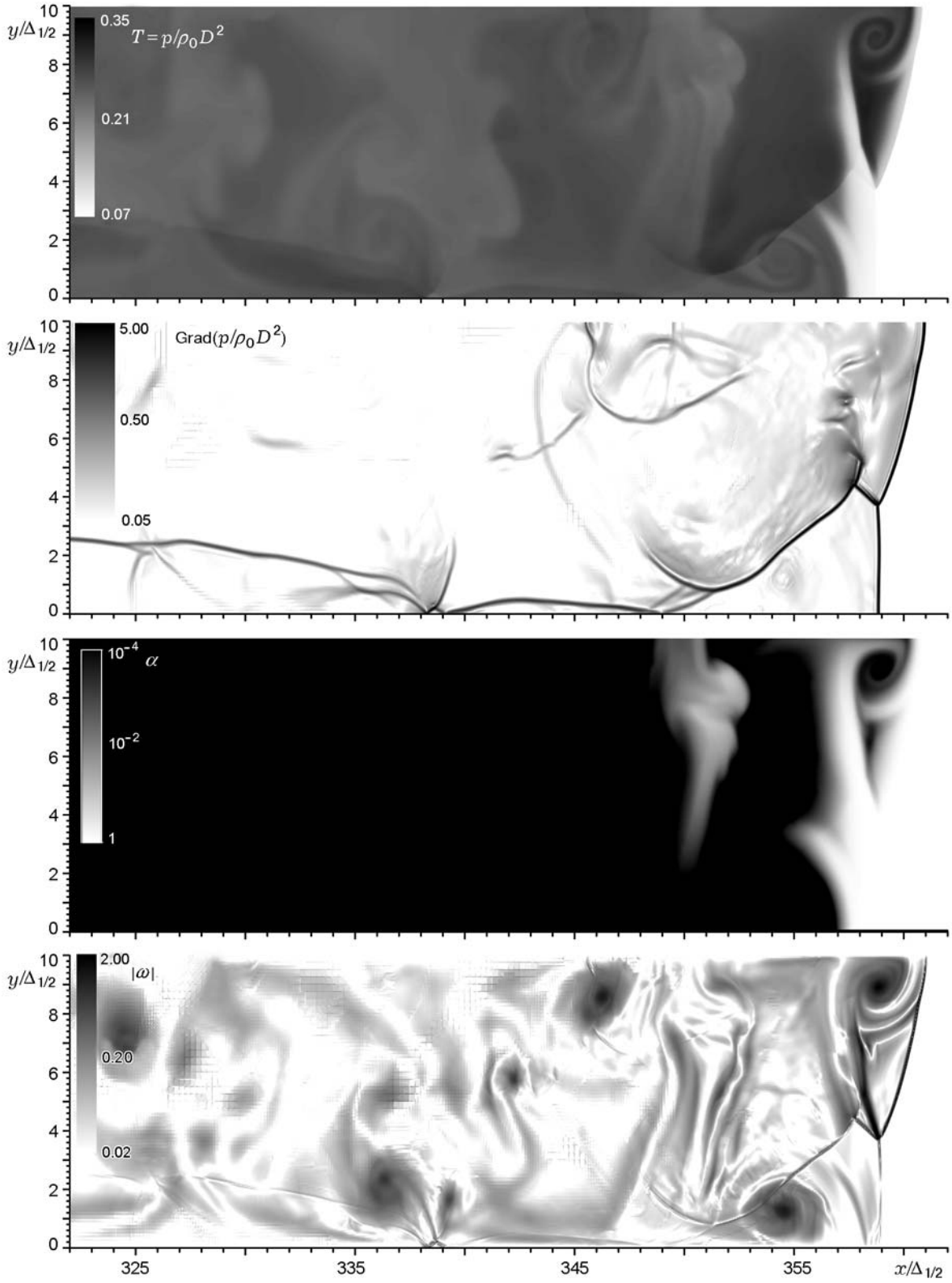


Рис. 15. Температура, градиент давления, концентрация реагентов и завихренность в процессе слабо неустойчивой детонации ($E_a/RT_0 = 27$)

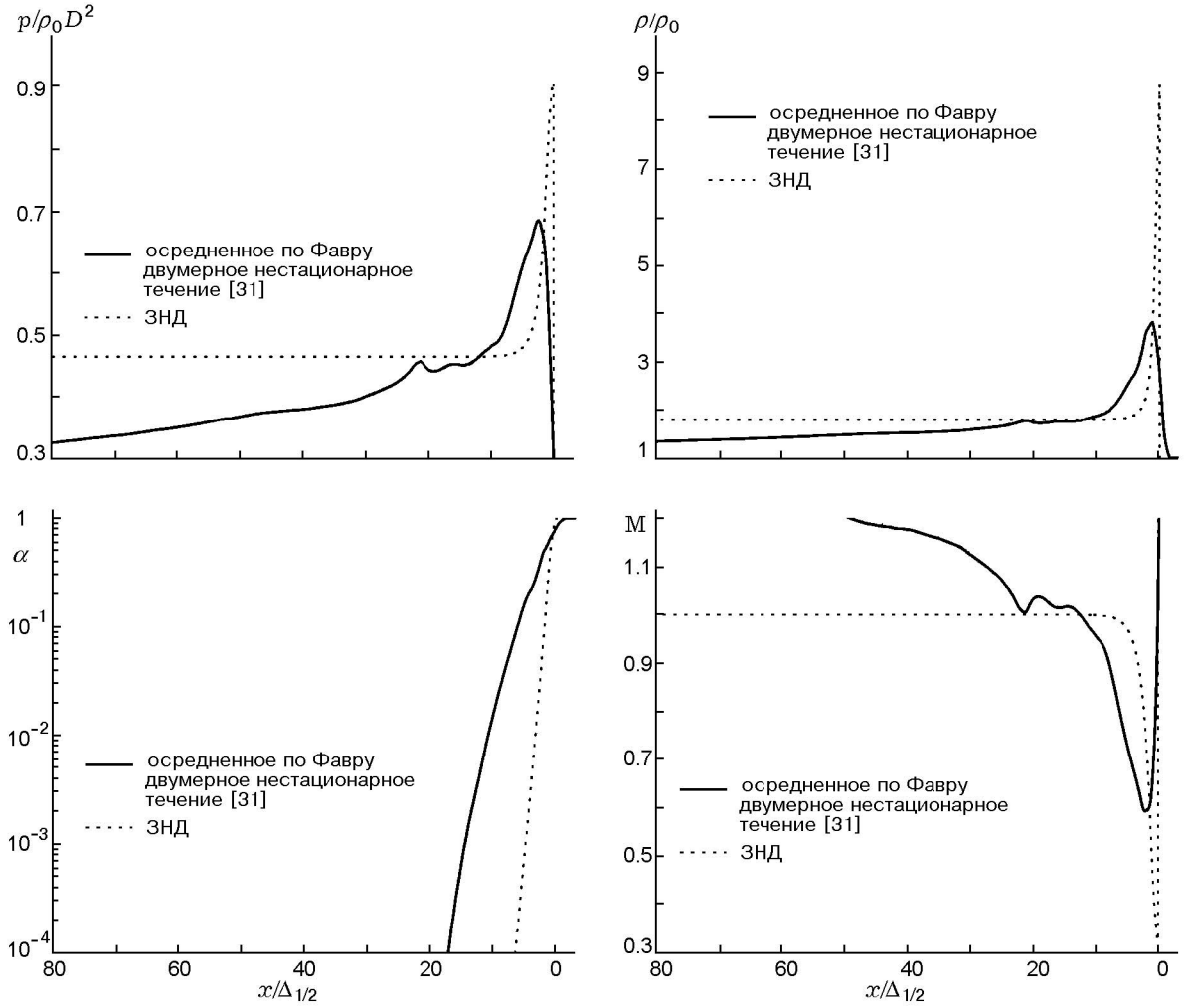


Рис. 16. Осредненные по Фавру [31] профили давления, плотности, концентрации реагентов и числа Маха для слабо неустойчивой волны детонации (для сравнения показаны профили ЗНД)

считанная по шести циклам ячейки, оказалась на 0.5 % ниже значения в теории Чепмена — Жуге, с доверительной вероятностью 0.3 %.

Осредненные по Фавру в зоне реакции профили давления, плотности, переменной α и числа Маха приведены на рис. 16. Отклонение профилей в зоне реакции от идеальной ЗНД-структуры намного менее заметно, а пики профилей отличаются в основном из-за пространственного и временнóго осреднения по пульсирующему ведущему фронту. Звуковая плоскость развивается приблизительно на расстоянии $12\Delta_{1/2}$ позади фронта, что намного меньше, чем для действительно неустойчивых детонаций, рассматриваемых выше. Вне звуковой точки неустановившееся тейлоровское расширение (разрежение) вызывает флуктуации, возможно как результат остаточных переходных процессов при инициировании. В звуковой плоскости среднее давление ниже, чем значение в теории Чепмена — Жуге, приблизительно на 1 %.

Так как найденная скорость волны ниже значения Чепмена — Жуге, интересно проанализировать, как распределяются энергетические моды в детонационной структуре. Для средней частицы среды, пересекающей эту статистически стационарную структуру детонации, полная энергия частицы сохраняется и распределяется между средней энтальпией, средней кинетической, химической потенциальной и турбулентной энергией согласно уравнению

$$E_{tot} = \frac{\gamma}{\gamma - 1}\frac{\bar{p}}{\bar{\rho}} + \frac{1}{2}\tilde{u}^2 + \alpha Q + E_{turb}.$$

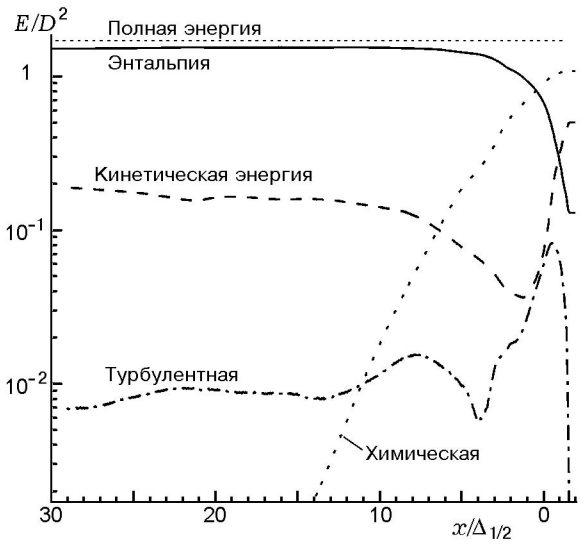


Рис. 17. Распределение энергии среднего элемента среды, пересекающего детонационную структуру в случае слабо неустойчивой детонации

Рис. 17 иллюстрирует это распределение. Турбулентная энергия была оценена вычитанием средних энергий из полной энергии в невозмущенном газе. После пересечения скачка, где турбулентная энергия достигает максимума, она медленно уменьшается, менее чем до 1 % от полной энергии. Интересно заметить, что в звуковой точке все еще присутствуют потенциальная химическая энергия ($\approx$0.3 % E_{tot}) и турбулентная энергия ($\approx$0.5 % E_{tot}). Эта суммарная энергия ($\approx$1 %), следовательно, высвобождается за звуковой точкой и не влияет на волну детонации. Так как скорость детонации изменяется как квадратный корень от доступной энергии, то дефицит энергии (δQ) связан с дефицитом скорости детонации (δD):

$$\frac{\delta D}{D} = \frac{1}{2}\frac{\delta Q}{Q}.$$

Дефицит энергии $\approx$1 %, таким образом, точно согласуется с наблюдаемым дефицитом скорости $\approx$0.5 %.

Итак, из вышеупомянутых численных экспериментов следует, что ячеистые детонации хорошо характеризуются средней звуковой поверхностью, расположенной на конечном расстоянии от фронта и отделяющей статистически стационарную детонационную структуру от неустановившегося расширения. Вообще, не вся доступная энергия высвобождается до звуковой поверхности, что приводит к дефициту скорости детонации. Большие количественные различия обнаружены между сильно неустойчивыми детонациями с интенсивной турбулентной структурой зоны реакции и слабо неустойчивыми детонациями. Для сильно неустойчивой детонации гидродинамическая толщина равна (по порядку) нескольким размерам ячеек λ, что согласуется с экспериментальными наблюдениями. Представляется, что этот масштаб длины обусловлен задержками химической и тепловой релаксации из-за формирования нереагирующих карманов, которые также вносят вклад в увеличение уровня механических флуктуаций в области течения. Положение звуковой поверхности в этом случае, по-видимому, лучше всего коррелирует с газодинамической релаксацией этих механических флуктуаций. Те же самые процессы работают и в слабо неустойчивых детонациях. Однако амплитуда флуктуаций более низкая и газы сгорают намного быстрее. В результате размер структуры слабо неустойчивых детонаций равен приблизительно половине ширины ячейки и намного ближе к идеальному ЗНД-профилю. В обоих случаях на гидродинамической толщине волны происходят процессы перехода к равновесию химической, механической и тепловой энергии.

3. МОДЕЛЬ ЯЧЕИСТОЙ ДЕТОНАЦИИ

Независимо от трехмерной турбулентной структуры ячеистой детонации, направление ее распространения все еще одномерно, если наблюдение ведется на большем масштабе, чем размер ячейки λ. И физические, и численные эксперименты предполагают, что ее скорость близка к значению Чепмена — Жуге, предсказанному на основе одномерных стационарных уравнений сохранения. Кажется, что ячеистая структура детонации может быть описана теоретически в одномерном приближении, если описание интерпретировать в вероятностном смысле.

В работах [10, 32–36] турбулентные пульсации предполагались малыми по сравнению со средними величинами и применялось разложение Рейнольдса к различным флуктуирующим величинам, сохранены только скоростные флуктуации u'' в описании турбулентности. В этих работах сделан вывод, что структура может быть описана средними одномерными

уравнениями потока, дополненными источниковыми членами в уравнениях импульса (напряжение Рейнольдса $(\overline{\rho u''^2})_x$) и энергии (работа, выполненная напряжением Рейнольдса, и дополнительные члены, включающие турбулентную кинетическую энергию u''^2). Отклонения от средних профилей могут, следовательно, рассматриваться как механическая флуктуация в уравнении импульса и флуктуация энергии в уравнении энергии. В присутствии этих источниковых членов в работах [10, 32–36] качественно описано отклонение реального пути выбранного среднего элемента среды от «ламинарной» линии Рэлея. Поскольку энергия включает в себя и «турбулентную» моду, получено, что кривая Гюгонио также изменяется. Авторы не пытались замкнуть систему определяющих уравнений, т. е. дать модель источниковых членов, так же как и не пытались формулировать более общий формализм, который позволил бы моделировать пренебрежимо малые члены (рассеяние турбулентной энергии, флуктуации плотности и давления и т. д.).

Более полное описание представлено в работе [29]. Авторы преобразовали по Фавру полные уравнения Навье — Стокса для реагирующих потоков и попытались выделить подсеточные члены, которые требуют моделирования.

Результаты вышеупомянутых моделей можно суммировать без явного обращения к функциональной форме источниковых членов, которые будут обсуждаться ниже. Предположим, что турбулентные источниковые члены можно моделировать в общей форме дополнительными процессами релаксации, встречающимися в детонационной структуре. Источниковый член в уравнении импульса управляет механической релаксацией. Флуктуации в энергетических модах обеспечивают процесс релаксации энергии через газодинамические расширения и молекулярную диссипацию. В установившейся структуре зоны реакции, рассматривая время t как единственную независимую переменную, определяющие уравнения можно записать в следующем виде:

$$\frac{dx}{dt} = u,$$

$$\frac{d(\rho u)}{dt} = 0,$$

$$\frac{d(p + \rho u^2)}{dt} = -\rho \dot{f},$$

$$\frac{d}{dt}\Big(\frac{\gamma}{\gamma - 1}\frac{p}{\rho} + \frac{1}{2}u^2\Big) = -\dot{\alpha}Q - \dot{g},$$

где производная по времени или производная, обозначенная точкой, представляют собой лагранжеву производную по времени перемещения осредненного положения «средней» частицы среды в зоне реакции; различные зависимые переменные — осредненные по Фавру характеристики лагранжевой частицы. Источниковые члены $\dot{f}$ и $\dot{g}$ описывают скорости релаксации любого источникового члена в уравнениях импульса и энергии и могут быть функциями любой зависимой переменной:

$$\dot{f} = \dot{f}(f, g, \alpha, t, \rho, u, ...),$$

$$\dot{g} = \dot{g}(f, g, \alpha, t, \rho, u, ...).$$

При механическом и тепловом равновесии $f = g = 0$. Скорость реакции $\dot{\alpha}$ также появляется как источниковый член в уравнении энергии, который описывает релаксацию к химическому равновесию, $\alpha \to 0$. Скорость реакции должна быть непосредственно сформулирована в терминах других зависимых средних переменных:

$$\dot{\alpha} = \dot{\alpha}(x, p, \rho, u, f, g, ...).$$

Состояние в конце зоны реакции, когда поток звуковой, нельзя получить на основе критерия равновесия Чепмена — Жуге (т. е. $f = g = \alpha = 0$), оно должно быть определено интегрированием определяющих уравнений для структуры между ведущим скачком и звуковой поверхностью. После перестановки определяющих уравнений получаем выражения для эволюции всех зависимых переменных, от скачка до звуковой поверхности:

$$\frac{\dot{u}}{u} = \frac{\Phi}{\eta}, \quad \frac{\dot{\rho}}{\rho} = -\frac{\Phi}{\eta}, \quad \frac{\dot{p}}{\rho u^2} = -\frac{\Phi + M^2 \dot{f}\eta}{\eta},$$

где

$$\Phi \equiv -(\gamma - 1)\dot{\alpha}Qc^2 + \gamma \dot{f}c^2 - (\gamma - 1)\dot{g}c^2, \quad (1)$$

$$\eta \equiv 1 - u^2/c^2 = 1 - \mathrm{M}^2. \quad (2)$$

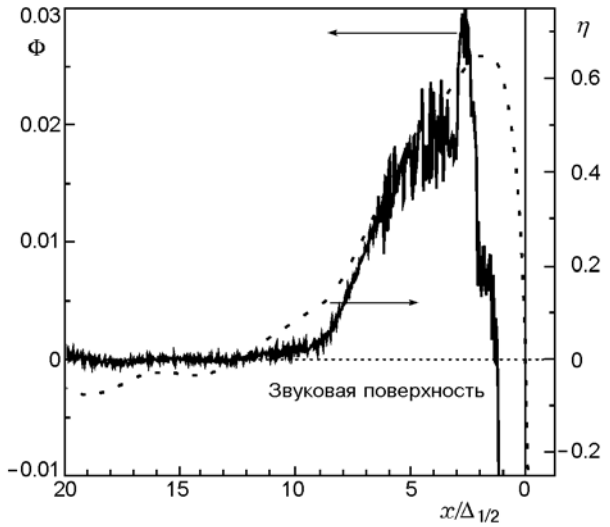


Рис. 18. Проверка обобщенного критерия Чепмена — Жуге для слабо неустойчивых волн детонации (см. рис. 14–16) согласно уравнениям (1) и (2)

Решение сингулярно на звуковой поверхности, где $\eta = 0$. Единственное решение для структуры зоны реакции получается при одновременном требовании $\Phi = 0$. Это обычный «обобщенный критерий Чепмена — Жуге» [37], который является базовым для присутствия любых источниковых членов в определяющих уравнениях (трения, теплопотерь, потерь массы и т. д.). Обобщенный критерий Чепмена — Жуге удовлетворяется только для определенной скорости волны детонации, которая является «собственным значением». Наряду с этим собственным решением и соотношениями на скачке можно проинтегрировать профили и определить положение звуковой поверхности. Понятно, что положение звуковой поверхности определяется балансом между скоростями релаксации $\dot{\alpha}$, $\dot{f}$ и $\dot{g}$. В [29] была проверена справедливость обобщенного критерия Чепмена — Жуге для ячеистых детонаций. На рис. 18 показаны величины Φ и η, полученные численно при осреднении результатов, установленных для обсуждавшейся выше ячеистой детонации. В звуковой плоскости обобщенный критерий Чепмена — Жуге проверен достаточно точно.

В рамках чисто эмпирической системы взглядов формализм релаксации для анализа ячеистой структуры детонации может быть сформулирован в виде соотношений для скоростей релаксации химических, механических и энергетических процессов, что напоминает модель BGK (Bhatnagar — Grass — Kruck) в статистической механике. Различные (постулируемые) члены релаксационных скоростей в принятых уравнениях могут быть легко установлены по результатам физических или численных экспериментов. В итоге можно получить достаточно адекватную модель для анализа структуры детонации и динамических параметров.

Однако желательно более реалистическое описание турбулентности и ее воздействия на глобальные скорости реакции. Современные модели турбулентности для дефлаграции (см. например, [38]) неадекватны, поскольку в них не учитываются эффекты сжимаемости, играющие весьма важную роль в зоне реакции ячеистых детонаций. При низкоскоростной турбулентности доминируют взаимодействия вихрь — вихрь, при таком механизме турбулентная кинетическая энергия каскадно переходит на малые диссипативные масштабы. Если преобладают эффекты сжимаемости и присутствуют сильные флуктуации давления, в равной степени важны такие продуцирующие завихренность механизмы, как скачок — вихрь и скачок — скачок (которые приводят к дополнительной завихренности через сдвиговые слои, генерируемые взаимодействиями в тройных маховских конфигурациях). Кроме того, химические реакции создают области и поверхности раздела с сильными градиентами плотности. Взаимодействующие градиенты давления и плотности приводят к образованию завихренности по механизму генерации бароклинной ($\nabla\rho\cdot\nabla p$) завихренности. Ударные взаимодействия с поверхностями раздела плотности также ведут к образованию турбулентности по тому же самому механизму, известному также как неустойчивость Рихтмайера — Мешкова — Маркштейна в контексте взаимодействия скачок — пламя. Таким образом, для описания источниковых членов в одномерной постановке необходимы модели, учитывающие механизм турбулентности в сжимаемом потоке. Турбулентная модель реакции также должна отражать эффекты сжимаемости в турбулентном потоке. Современные модели турбулентных дефлаграций (например, ламинарная беспламенная модель) неадекватно описывают ячеистую детонацию. Кроме того, в детонации турбулентные флуктуации (давления, скорости и плотности) являются прямым следствием экзотермичности, тогда как при изучении горе-

ния они предполагаются заданными (например, турбулентный поток в трубе). Развитие этих источниковых членов было бы стимулирующей задачей.

Итак, на основе вышеизложенного представляется, что теорию ячеистой детонации все же можно сформулировать в рамках существующей одномерной стационарной модели ЗНД. Однако трехмерные переходные эффекты должны быть при этом включены в турбулентность и модели скоростей реакции, которые сохранены в качестве источниковых членов в уравнениях ЗНД для среднего потока.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Вторая половина XX столетия обеспечила нас детальной информацией о трехмерной переходной ячеистой структуре волн детонации. Эта совокупность данных лишает законной силы классическую модель ЗНД для анализа структуры детонации. Важные последствия этого таковы:

1) мы больше не можем определять равновесное состояние детонации правильно (т. е. скорость детонации, давление, плотность, концентрации продуктов и т. д.) на основе равновесных уравнений сохранения на волне и критерия Чепмена — Жуге (звуковое условие в плоскости равновесия);

2) мы не можем определять поток непосредственно в пределах структуры, а следовательно, и толщину зоны реакции. В результате мы не можем определять динамические параметры (т. е. пределы, критическую энергию инициирования, критический диаметр трубы и т. д.).

Однако, несмотря на трехмерную нестационарную турбулентную структуру детонации, волновой комплекс все еще распространяется как одномерная волна со стационарной средней скоростью в направлении движения. Таким образом, все еще важно говорить об одномерной теории для ячеистых детонаций, основанной на средних свойствах потока. Однако такая одномерная теория должна включать уравнения сохранения с источниковыми членами в уравнениях импульса и энергии, чтобы учитывать большие турбулентные флуктуации. Из-за этих источниковых членов состояние среднего лагранжевого элемента реагирующего потока больше не следует линии Рэлея из начального состояния реагентов в конечное состояние продуктов. Фактически метод определения стационарного состояния детонации подобен определению собственного значения детонации, т. е. рассматривается решение, которое является регулярным, когда достигается звуковое условие. В звуковой плоскости (основанной на средних потоковых количествах) состояние среды больше не находится в тепловом и химическом равновесии. Именно поэтому состояние детонации не может быть определено без интегрирования осредненных уравнений потока для неравновесной структуры.

Существование звуковой плоскости, основанной на средних свойствах потока, не очевидно на первый взгляд. Однако, как было сказано еще в работе [15], если детонационный комплекс распространяется со стационарной средней скоростью потока, то звуковая плоскость должна существовать, отделяя установившийся средний поток в структуре волны от нестационарного осредненного расширяющегося потока в продуктах. Существование неустановившегося среднего расширяющегося потока позади детонации, распространяющейся в закрытой трубе (т. е. тейлоровской волны), следует из закона сохранения массы. Таким образом, в одномерной теории установившегося (среднего) процесса распространения ячеистой детонации необходимы дифференциальные уравнения для среднего потока.

Ясно, что задача формулировки стационарной одномерной теории для ячеистых детонаций сосредоточена на развитии моделей турбулентности, чтобы описывать поток в зоне реакции ячеистой детонации. Так как эффекты сжимаемости доминируют в зоне реакции ячеистых детонаций, механизмы турбулентности оказываются не теми же самыми, что для турбулентных пламен (турбулентность в несжимаемом потоке). Поскольку присутствуют сильные поперечные скачки, приобретают значимость взаимодействия скачок — скачок и скачок — вихрь. При наличии химических реакций, которые служат для поддержания турбулентности, генерируются сильные поверхности раздела. Таким образом, взаимодействия «скачок — поверхности раздела плотности» и более общий бароклинный механизм крутящего момента для генерации завихренностей весьма важны в зоне реакции ячеистых детонаций. Необходимо развивать модели турбулентности, которые включали бы все вышеупомянутые механизмы турбулентности. Отметим, что моделирование скоростей реакции в сжима-

емом турбулентном потоке представляет очень сложную задачу.

Наряду с формулированием моделей турбулентности, требуется большая база экспериментальных данных. И хотя уже более 50 лет известно, что детонации являются турбулентными, никакого систематического накопления информации о свойствах турбулентной детонации не ведется. Например, существует только ограниченное количество корректных данных относительно скорости детонации и профилей среднего давления и плотности в осредненной зоне реакции. В отличие от идеальной детонации Чепмена — Жуге, стационарные средние состояния ячеистой детонации в ограниченных по размеру детонационных трубах зависят от граничных условий из-за потерь в стенки [4, 23]. Эти потери затрагивают структуру самого процесса [36]. Систематические исследования влияния диаметра трубы и кривизны фронта детонации на скорость детонации проводились лишь группой в Пуатье под руководством Мансона в 1960-х годах. Важно продолжить эту раннюю работу и получить хорошую базу данных по установившимся (средним) состояниям детонации при различных граничных условиях. Измерение изменений средних свойств потока при различных граничных условиях в неравновесной зоне реакции ячеистых детонаций — задача более трудная из-за высокой перемежаемости, наблюдаемой в процессе турбулентной детонации. Однако для определения средних параметров такие методы, как рентгеновский для измерения глобальной плотности [39] или спектроскопические для измерения температуры, доступны и намного проще, чем точечные измерения в трехмерной области потока. Они могут служить для определения средних свойств структуры детонации в направлении распространения.

Имеется, однако, один параметр, который можно измерять с определенной точностью и который мог бы стать наиболее полезным при развитии соответствующих моделей, — это эффективная толщина зоны реакции в направлении распространения. Трудно определить толщину зоны реакции, основываясь только на механической или химической релаксации, так как они не согласуются с выполнением звукового условия. Поэтому наиболее приемлемый масштаб длины, который может характеризовать среднее установившееся распространение детонации, должен определяться координатой звуковой плоскости как собственным значением решения уравнения для стационарной детонационной волны, определенным на основе регулярного решения в сингулярной звуковой плоскости, т. е. в результате баланса между различными релаксационными процессами. Так как звуковая плоскость представляет собой гра-

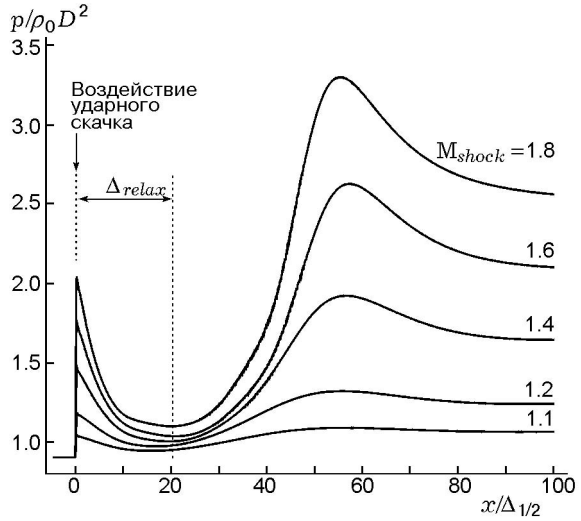


Рис. 19. Давление на фронте детонационной волны после одномерного взаимодействия слабого ударного скачка различной амплитуды с фронтом стационарной детонации ($E_a/RT_0 = 20$, $Q/RT_0 = 50$, $\gamma = 1.2$) (из [40])

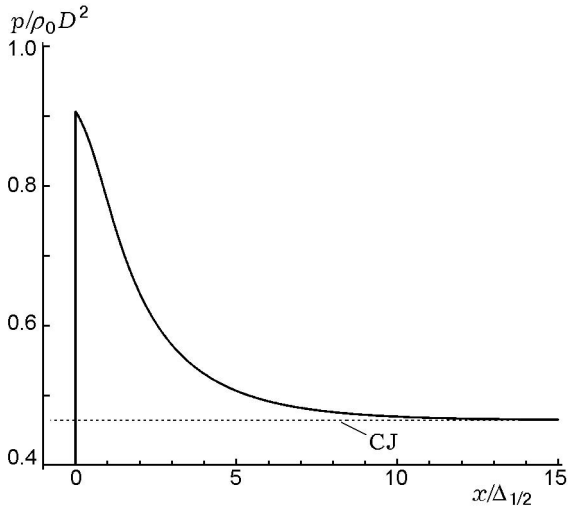


Рис. 20. ЗНД-структура волны детонации, соответствующей рис. 18

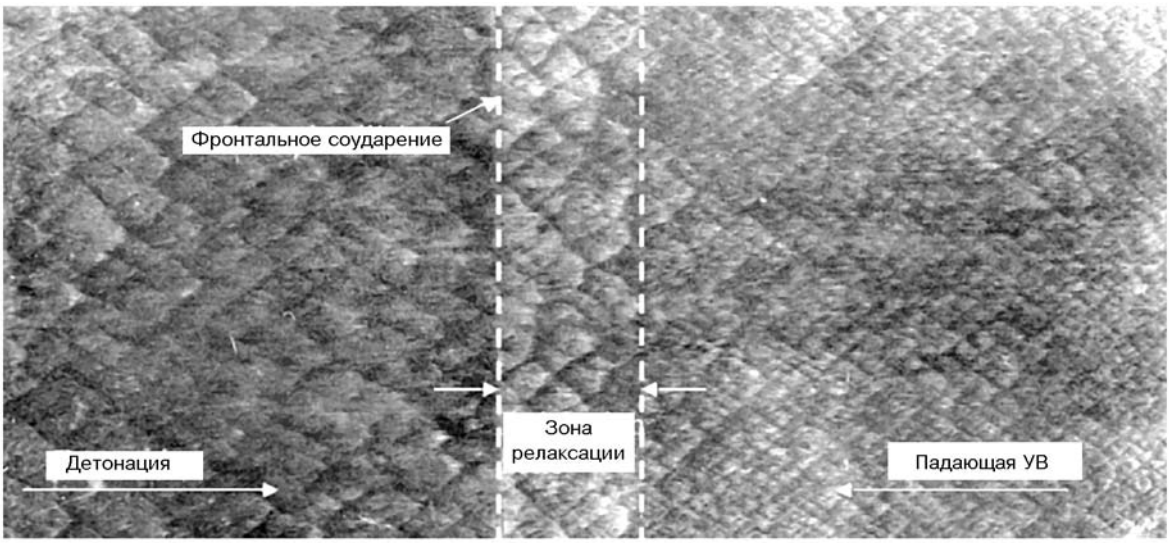


Рис. 21. Изменение ячеистой структуры детонации в пропанокислородной смеси после лобового взаимодействия со слабой ударной волной, полученное на закопченной фольге

ничную характеристику, которая перемещается параллельно волне детонации, можно проследить траектории слабых ударных волн, генерируемых вслед за детонацией, и тем самым определить положение предельной характеристической поверхности, что и было выполнено численно в работе [16] для одномерной неустановившейся детонации. Так как звуковая поверхность представляет собой разрыв первого порядка вслед за детонацией, этот разрыв, вероятно, можно обнаружить экспериментально как отклонение от средних измеренных профилей давления или плотности. Такие попытки предпринимались Эдвардсом [11] и Р. И. Солоухиным [8]. Определение звуковой плоскости в лабораторной системе координат методом головного скачка, первоначально использованным А. А. Васильевым и др. [17] и усовершенствованным Вебером и Оливье [18], также может быть полезен, хотя и не обеспечивает положения истинной звуковой поверхности, которая служит граничной характеристикой.

Недавно в работе [40] был предложен метод, включающий головное взаимодействие между волной детонации и слабым скачком, который позволяет определить положение звуковой плоскости. Слабый скачок используется как пробник, чтобы обеспечить одномерное возмущение ячеистой детонации. При прохождении через ведущий ячеистый ударный фронт скачок будет пересекать зону реакции. Ведущий скачок отражается от больших градиентов плотности вблизи конца зоны реакции в виде волны разрежения, которая достигает ведущий фронт с некоторой задержкой и ослабляет ведущий скачок. Поскольку длина, проходимая волной детонации до полного ослабления, прямо пропорциональна ее толщине, можно косвенно измерить размер зоны реакции. Результат вычисления взаимодействия «головы» ударной волны с одномерной ЗНД-детонацией представлен на рис. 19. Найдено, что длина релаксации приблизительно в 2–3 раза больше толщины зоны реакции невозмущенной детонации (рис. 20). Этот метод вполне применим в реальном эксперименте, поскольку длину релаксации можно измерить непосредственно на закопченной фольге. Результаты изучения детонации пропанокислородной смеси показаны на рис. 21. Появление (мелкомасштабных) тонких ячеек во фронте аналогично усилению давления в одномерном профиле, показанном выше, и их появление обозначает окончание процесса ослабления.

При наличии хорошей базы данных, характеризующих ячеистую детонацию в широком диапазоне граничных условий, и данных для соответствующего масштаба длины, характеризующего зону реакции, могут быть разработаны модели турбулентности, которые позволяют создать теорию ячеистой детонации. Разработка корректной модели турбу-

лентности чрезвычайно трудная задача, но это как раз то направление, в котором должны идти будущие исследования.

Авторы выражают благодарность С. Фалле и Г. Шарпе за предоставление численного кода и техническую поддержку в проведении части расчетов. М. И. Радулеску благодарит С. К. Лоу за плодотворные обсуждения и FCAR, NSERC и BP CMI в Принстонском университете за финансовую поддержку данного исследования. Авторы также благодарят Х. Д. Нга за проведение ударно-детонационных вычислений, результаты которых представлены на рис. 19.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Schelkin K. I., Troshin Ya. K.** Gasdynamics of Combustion. Baltimore, 1965.
2. **Lee J. H. S.** Dynamic parameters of gaseous detonations // Ann. Rev. Fluid Mech. 1984. V. 16. P. 311–336.
3. **Radulescu M. I., Lee J. H. S.** The failure mechanism of gaseous detonations: experiments in porous wall tubes // Combust. Flame. 2002. V. 131. P. 29–46.
4. **Moen I. O., Sulmistras A., Thomas G. O., et al.** Influence of cellular regularity on the behavior of gaseous detonations // Dynamics of Explosions / J. R. Bowen, J.-C. Leyer, R. I. Soloukhin (Eds). (Prog. Astronaut. and Aeronaut.; V. 106). P. 220–243.
5. **Lee J. H. S.** The propagation mechanism of cellular detonation. Plenary lecture // Proc. of the 24th Intern. Symp. on Shock Waves, China, 2004.
6. **Soloukhin R. I.** Nonstationary phenomena in gaseous detonation // Proc. Combust. Inst. 1969. V. 12. P. 799–807.
7. **Lee J. H., Soloukhin R. I., Oppenheim A. K.** Current views on gaseous detonation // Astronaut. Acta. 1969. V. 14. P. 565–584.
8. **Soloukhin R. I.** Multiheaded structure of gaseous detonation // Combust. Flame. 1966. V. 10. P. 51–58.
9. **Lundstrom E. A., Oppenheim A. K.** On the influence of non-steadiness on the thickness of the detonation wave // Proc. Roy. Soc. A. 1969. V. 310. P. 463–478.
10. **Strehlow R. A.** Detonation structure and gross properties // Combust. Sci. Technol. 1971. V. 4. P. 65–71.
11. **Edwards D. H., Jones A. J., Phillips D. E.** Location of Chapman–Jouguet surface in a multiheaded detonation-wave // J. Phys. D: Appl. Phys. 1976. V. 9. P. 1331–1342.
12. **Austin J. M., Pintgen F., Shepherd J. E.** Reaction zones in highly unstable detonations // Proc. Combust. Inst. 2005. V. 30. P. 1849–1857.
13. **Radulescu M. I., Sharpe G. J., Lee J. H. S., et al.** The ignition mechanism in irregular structure gaseous detonations // Ibid. P. 1859–1867.
14. **Jost W.** Explosion and Combustion Processes in Gases. New York, London: McGraw-Hill, 1946.
15. **Taylor G.** The dynamics of the combustion products behind plane and spherical detonation fronts in explosives // Proc. Roy. Soc. A. 1950. V. 200, N 1061. P. 235–247.
16. **Kasimov A. R., Stewart D. S.** On the dynamics of self-sustained one-dimensional detonations: a numerical study in the shock-attached frame // Phys. Fluids. 2004. V. 16, N 10. P. 3566–3578.
17. **Vasil'ev A. A., Gavrilenko T. P., Topchian M. E.** On the Chapman–Jouguet surface in multi-headed gaseous detonations // Astronaut. Acta. 1972. V. 17. P. 499–502.
18. **Weber M., Olivier H.** The thickness of detonation waves visualized by slight obstacles // Shock Waves. 2004. V. 13, N 5. P. 351–365.
19. **Gavrikov A. I., Efimenko A. A., Dorofeev S. B.** A model for detonation cell size prediction from chemical kinetics // Combust. Flame. 2000. V. 120, N 1, 2. P. 19–33.
20. **Sharpe G. J.** The structure of planar and curved detonation waves with reversible reactions // Phys. Fluids. 2000. V. 12, N 11. P. 3007–3020.
21. **Fickett W., Davis W. C.** Detonation. Berkley: Univ. of California Press, 1979.
22. **Stewart D. S., Yao J.** The normal detonation shock velocity — curvature relationship for materials with non-ideal equation of state and multiple turning points // Combust. Flame. 1998. V. 113. P. 224–235.
23. **Зельдович Я. Б.** К теории распространения детонации в газообразных системах // ЖЭТФ. 1940. Т. 10. С. 542–568.
24. **Васильев А. А., Митрофанов В. В., Топчиян М. Е.** Детонационные волны в газах // Физика горения и взрыва. 1987. Т. 23, № 5. С. 109–131.
25. **Денисов Ю. Н., Трошин Я. К.** Пульсирующая и спиновая детонация газовых смесей в трубах // Докл. АН СССР. 1959. Т. 125. С. 110–113.
26. **Pintgen F., Eckett C. A., Austin J. M., Shepherd J. E.** Direct observations of reaction zone structure in propagating detonations // Combust. Flame. 2003. V. 133, N 3. P. 211–229.
27. **Vasil'ev A. A., Nikolaev Y.** Closed theoretical model of a detonation cell // Acta Astronaut. 1978. V. 5. P. 983–996.
28. **Субботин В. А.** Два типа структуры поперечных волн в многофронтовой детонации // Физика горения и взрыва. 1975. Т. 11, № 1. P. 96–102.
29. **Radulescu M. I., Sharpe G. J., Law C. K.** The Favre-averaged structure of turbulent cellular detonations // Proc. of the 20th ICDERS, Montreal, Canada, July 2005.

30. **Sharpe G. J.** Transverse waves in numerical simulations of cellular detonations // J. Fluid Mech. 2001. V. 447. P. 31–51.
31. **Favre A.** Equations des gas turbulents compressibles // J. de Mécanique. 1965. V. 4. P. 361–421.
32. **Войцеховский Б. В., Митрофанов В. В., Топчиян М. Е.** Структура фронта детонации в газах. Новосибирск: Изд-во СО АН СССР, 1963.
33. **White D. R.** Turbulent structure of gaseous detonation // Phys. Fluids. 1961. V. 4. P. 465–480.
34. **Panton R.** Effects of structure on average properties of two-dimensional detonations // Combust. Flame. 1971. V. 16. P. 75–82.
35. **Рыбанин С. С.** Турбулентность при детонации // Физика горения и взрыва. 1966. Т. 2, № 1. С. 29–35.
36. **Николаев Ю. А., Зак Д. В.** Квазиодномерная модель самоподдерживающейся многофронтовой газовой детонации с учетом потерь и турбулентности // Физика горения и взрыва. 1989. Т. 25, № 2. P. 103–112.
37. **Bdzil J. B.** Steady-state two-dimensional detonation // J. Fluid Mech. 1981. V. 108. P. 195–226.
38. **Peters N.** Turbulent Combustion. Cambridge, UK: Cambridge Univ. Press, 2000.
39. **Kistiakowsky G. B., Kydd P. H.** Gaseous detonations. IX. A study of the reaction zone by gas density measurements // J. Chem. Phys. 1956. V. 25, N 5. P. 824–835.
40. **Ng H. D., Nikiforakis N., Lee J. H. S.** Head-on collision of a detonation with a planar shock wave // Proc. of the 24th Intern. Symp. on Shock Waves, China, 2004; Also: Ng H. D., Botros B. B., Chao J., et al. Head-on collision of a detonation with a planar shock wave // Submitted to «Shock Waves», Oct. 2004.

Поступила в редакцию 24/II 2005 г.