

А. А. Борисов, О. В. Шарыпов

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕХОДА ОТ РЕГУЛЯРНОЙ К НЕРЕГУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЕ ЯЧЕИСТОГО ФРОНТА ГАЗОВОЙ ДЕТОНАЦИИ

Приводятся теоретические результаты по описанию перехода от регулярной структуры волны газовой детонации к нерегулярной. На основе оригинальной модели определен управляющий параметр. При превышении критического значения данного параметра решение, моделирующее пульсирующий ячеистый фронт волны, переходит от регулярного циклического (квазистационарного) режима к аperiodическому, ячейки начинают существенно различаться по размерам. Сформулированный критерий качественно и количественно хорошо согласуется с известными экспериментальными данными.

В ряде экспериментальных работ [1] отмечено, что в зависимости от условий известная ячеистая структура газовой детонации может иметь регулярный или нерегулярный характер. Как правило, эти данные относятся к детонации в узких зазорах (и соответственно — к двумерной структуре). Под регулярностью в идеале понимается наличие строго периодической структуры (с периодом, равным размеру характерной неоднородности фронта). При этом все ромбовидные ячейки будут иметь одинаковую форму и размеры. В действительности обычно используется понятие относительной регулярности структуры детонационной волны, когда можно пренебречь разбросом ячеек по размерам (по сравнению с характерным масштабом наблюдаемой структуры).

В настоящей работе предпринята попытка описать наблюдаемый в экспериментах ([1] и др.) переход от регулярной к нерегулярной ячеистой структуре фронта газовой детонации.

Краткое описание модели

Для рассмотрения вопроса о регулярности ячеистой структуры воспользуемся предложенной в [2, 3] оригинальной моделью эволюции изначально плоского детонационного фронта. Отличия этой модели от других известных подходов [4—6] заключаются в следующем.

1. Линейный анализ устойчивости плоской стационарной волны Зельдовича — Неймана — Деринга проводится в непосредственной близости от ударного фронта, что позволяет существенно упростить исходную задачу, приближенно сведя ее к системе однородных линейных дифференциальных уравнений для возмущений газодинамических и кинетических параметров.

2. Общая зависимость инкремента линейных возмущений плоского фронта от волнового числа, полученная с помощью законов сохранения на возмущенном ударном фронте, упрощена благодаря предположению о слабой надкритичности, т. е. допущению о том, что амплитуда неустойчивых возмущений нарастает за характерное время, намного превышающее время химического процесса.

3. Учитывается нелинейный механизм (механизм «формирования угловых точек» [7]), стабилизирующий неустойчивость решения линеаризованной задачи.

В модели традиционно не рассматриваются эффекты вязкости, теплопроводности и диффузии, используется одноступенчатый кинетический закон аррениусовского типа, термодинамические свойства газовой смеси считаются постоянными при переходе через ударный фронт.

На основе полученной упрощенной дисперсионной зависимости и учтенной нелинейности с помощью разработанного численного алгоритма удалось получить решение, удовлетворительно моделирующее динамику

пульсирующего ячеистого фронта газовой детонации [8]. Решение линейризованной задачи представляется в виде суммы (интеграла) гармоник

$$F_{l,m} = f_{l,m} \exp(\Omega_{l,m} t + ik_l y + ig_m z),$$

где i — мнимая единица; $\text{Re}(F)$ — координата фронта; $\text{Im}(F)$ — вспомогательная функция, не несущая определенного физического смысла; k, g — волновые числа возмущений; $\text{Im}(\Omega)$ — параметр, связанный с движением гармоник в плоскости фронта (иными словами — с пульсациями ячеистого фронта); $\text{Re}(\Omega)$ — инкремент линейных возмущений. Уравнение поверхности фронта детонации записывается в виде

$$x - x_0 = \text{Re}\{F(t, y, z)\},$$

где x_0 — координата плоского детонационного фронта, движущегося влево вдоль оси x со скоростью D . За ударным фронтом в области $x \rightarrow x_0$ имеют место следующие приближенные безразмерные зависимости [8]:

$$\text{Im}(\Omega) \approx \pm C\kappa, \quad (1)$$

$$\text{Re}(\Omega) \approx -\kappa + \frac{\kappa^2}{\alpha(\kappa^2 - 1) + 1}. \quad (2)$$

Здесь $\kappa = (k^2 + g^2)^{1/2}$ — модуль волнового вектора возмущения (здесь и далее индексы l, m опущены, чтобы избежать загромождения формул, роль их очевидна); C — скорость волнового движения линейных возмущений в плоскости ударной волны;

$$\alpha = \frac{3 - \gamma}{1 + \gamma} \left(1 - \frac{\rho_-}{\rho_0} \right) \frac{E}{RT_0} -$$

единственный управляющий параметр линейной задачи, учитывающий термодинамические свойства газовой смеси, интенсивность ударной волны и влияние химической кинетики; E — безразмерная энергия активации; γ — показатель адиабаты; ρ — плотность газовой смеси; индексы: минус обозначает состояние перед ударным фронтом, 0 — состояние непосредственно за ударным фронтом детонационной волны (при $x \rightarrow x_0 + 0$). В дальнейшем безразмерный комплекс E/RT_0 будем обозначать E .

В качестве безразмеривающих параметров используются характерное время химического процесса (время индукции), ρ_0 , массовая скорость и температура газа за ударным фронтом (при $x \rightarrow x_0 + 0$).

Соотношение (2) справедливо в области $\kappa \rightarrow 1$. Оно указывает на неустойчивость возмущений с волновыми числами $\kappa < 1$: $\text{Re}(\Omega) > 0$. Кроме того, зависимость (2) имеет точную асимптотику в случае $\kappa \gg 1$:

$$\text{Re}(\Omega) \rightarrow -\kappa, \quad (3)$$

$$\text{Re}(\Omega) \rightarrow -\kappa + 1/\alpha. \quad (4)$$

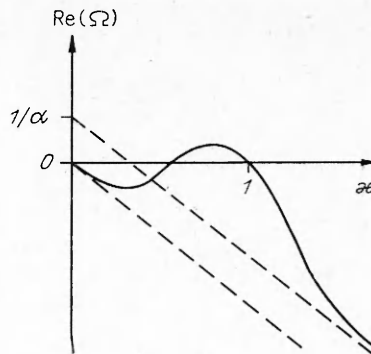
Заметим, что выражения (3) и (4) совпадают, если реакция отсутствует (т. е. $\alpha \rightarrow \infty$). Предельные соотношения (3) и (4) соответствуют результатам линейного анализа устойчивости ударной волны сжатия [9]. Можно сделать вывод о том, что химическая реакция влияет на устойчивость лишь тех возмущений, длина волны которых близка к характерному химическому масштабу ($\kappa \sim 1$).

Зависимость (2) имеет особенность при $\kappa^2 = 1 - 1/\alpha$, возникающую в результате отбрасывания в полном дисперсионном соотношении высших степеней инкремента (в соответствии с предположением о слабой надкритичности). Для устранения особенности соотношение (2) можно разложить в ряд по малому параметру ($\kappa - 1$):

$$\text{Re}(\Omega) \approx -\kappa + (\alpha + 1)\kappa^2 - \alpha\kappa^4. \quad (5)$$

Выражение (5) является точным в области $\kappa \rightarrow 1$ и $\kappa \ll 1$, однако дает неверную зависимость при $\kappa \gg 1$. Учитывая свойства полученных прибли-

Рис. 1. Вид зависимости инкремента линейных возмущений от модуля волнового числа (штриховыми линиями отмечена область неустойчивых возмущений).



женных зависимостей $\text{Re}\{\Omega(\kappa)\}$ (2) и (5), можно прийти к следующему выводу: для моделирования динамики линейных возмущений плоского фронта целесообразно пользоваться дисперсионной зависимостью (5) в длинноволновой области ($\kappa \leq 1$) и зависимостью (2) в коротковолновой области спектра ($\kappa \geq 1$), при $\kappa = 1$ обе зависимости гладко сшиваются. Результирующий вид кривой $\text{Re}\{\Omega(\kappa)\}$ показан на рис. 1.

Для плоского случая (детонация в узком зазоре) результаты линейного анализа, дополненные соображениями о нелинейном стабилизирующем механизме, можно представить в форме эволюционного уравнения [8]

$$\frac{\partial F}{\partial t} = L(F) - \frac{D}{2} \left(\frac{\partial F}{\partial y} \right)^2, \quad (6)$$

где L — интегродифференциальный оператор, определенный обратным преобразованием Фурье от правых частей выражений (1) и (2) (или (1) и (5)).

Описание численного решения

Численный алгоритм представляет собой следующую циклическую последовательность операций:

- 1) задание решения на n -м временном шаге;
- 2) быстрое преобразование Фурье;
- 3) пересчет значений амплитуд гармоник по дисперсионным соотношениям (1) и (2) (или (1) и (5));
- 4) обратное быстрое преобразование Фурье;
- 5) внесение поправки за счет нелинейности, рассчитанной по значениям на n -м шаге по разностной схеме;
- 6) определение решения на временном шаге $n + 1$.

Используются периодические граничные условия, число гармоник составляет 129, $D = 6$, шаг по времени равен 0,025, а расстояние между узлами сетки 0,2. Таким образом, в расчетной области умещается пять-шесть ячеек.

При достаточно малых значениях параметра α решение имеет характер регулярного циклически пульсирующего ячеистого фронта, воспроизводит следовые отпечатки газовой детонации (рис. 2, 3).

Переход

от случая регулярного решения к нерегулярному

В работе [1] приведены данные, свидетельствующие о том, что для различных реакций с увеличением E нарастает нерегулярность ячеистой структуры детонации. Существует критическое значение параметра E_c , условно разделяющее детонационные режимы на регулярный (при $E \leq E_c$), переходный ($E \sim E_c$) и нерегулярный ($E \geq E_c$), где

$$5,45 \leq E_c \pm 0,15 \leq 6,35. \quad (7)$$

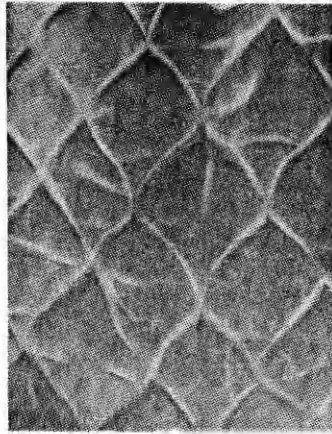


Рис. 2. Фотография следового отпечатка детонационной волны на закопченной боковой поверхности узкого зазора между двумя коаксиальными цилиндрами [10].

Кроме того, в [11] отмечено влияние интенсивности ударной волны и показателя адиабаты газовой смеси на степень нерегулярности ячеистой структуры волны.

При описании достаточно интенсивных $\left(\frac{\rho_-}{\rho_0} \rightarrow \frac{\gamma-1}{\gamma+1}\right)$ детонационных волн единственным свободным параметром в модели является α (см. (6)). Нетрудно убедиться, что с увеличением α расширяется область неустойчивых гармоник в спектре (см. (5)). Это приводит к появлению новых длинноволновых гармоник и нарушению периодичности решения: ячейки приобретают неправильную форму, сильно различаются по размерам (см. рис. 3—5).

Отметим, что значение α зависит от E , γ и интенсивности ударной волны (ρ_-/ρ_0) , что качественно согласуется с данными [1, 11]. Результаты численных расчетов, выполненных при различных значениях α , приводят к следующим выводам.

1. Согласно модели, параметр $\text{Im}(\Omega)$ не оказывает влияния на ширину спектра решения, а приводит лишь к циклическим изменениям («столкновениям» волн, распространяющихся в плоскости фронта), что подтверждается и расчетами; иными словами, регулярность решения определяется действительной частью дисперсионной зависимости $\Omega(\kappa)$ (см. результаты расчетов при $\text{Im}(\Omega) = \pm C\kappa$ (см. рис. 3, а, 4, а, 5) и в случае $\text{Im}(\Omega) = 0$ (см. рис. 3, б, 4, б)).

2. При $\alpha \leq 2,5$ решение строго периодическое, в случае $\text{Im}(\Omega) = 0$ оно выходит на стационарный режим (см. рис. 3), и проекция фазовой

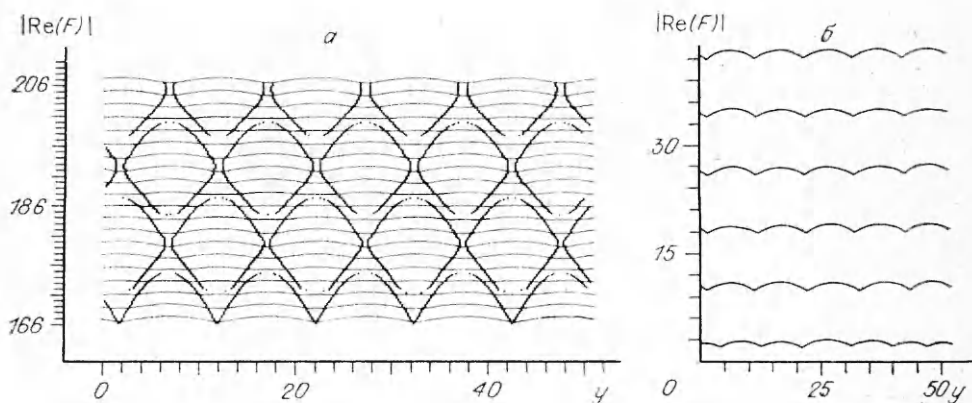


Рис. 3. Пример регулярного решения при $\alpha = 2,5$.

а) $C \neq 0$ (штриховые линии ограничивают окрестность траекторий минимумов функции $\text{Re}\{F(\tau i, y)\}$); б) эволюция решения в случае $C = 0$ (моменты времени: 25,0, 50,0, 75,0, 100,0, 125,0 и 150,0).

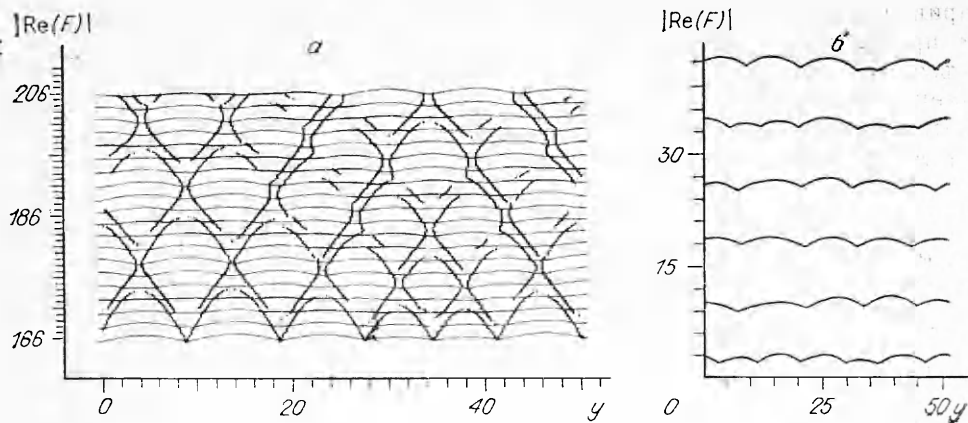


Рис. 4. Заметно нерегулярное решение при $\alpha = 2,75$.
 а) $C \neq 0$; б) эволюция решения в случае $C = 0$ (моменты времени: 25,0, 50,0, 75,0, 100,0, 125,0 и 150,0).

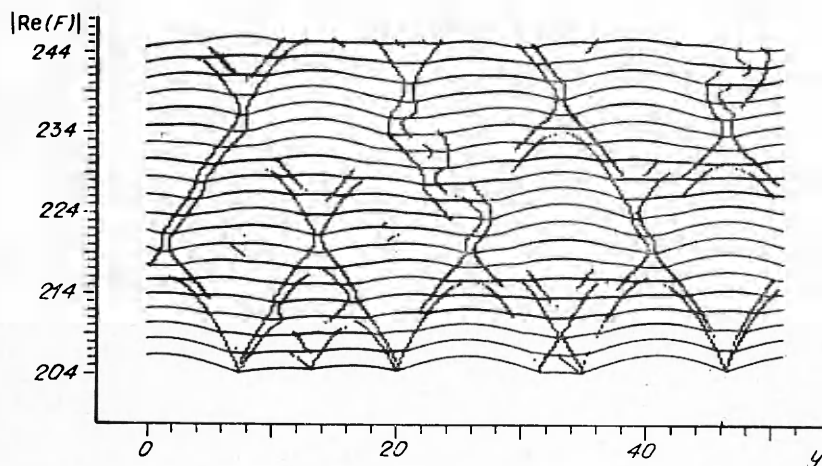


Рис. 5. Пример существенно нерегулярного решения при $\alpha > \alpha_c$ ($\alpha = 3,75$).

траектории на плоскость $\left(\text{Re}(F), \frac{\partial \text{Re}(F)}{\partial y} \right)$ представляет собой одну замкнутую петлю.

3. Если $\alpha \geq 2,75$, решение заметно нерегулярное, нестационарное (см. рис. 5), проекция фазовой траектории состоит из нескольких различающихся петель, подтверждая отсутствие периодичности решения.

4. Переход к нерегулярному решению происходит плавно при превышении параметром α критического значения α_c , разграничивающего регулярные и нерегулярные режимы, причем

$$\alpha_c \approx 2,75. \quad (8)$$

5. Если принять $\left(\frac{\rho_-}{\rho_0} = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right)$ и $\gamma = 1,4$, то можно сопоставить значения α_c и E_c :

$$\alpha_c \sim E_c/2. \quad (9)$$

Из (9) видно, что результат (8), полученный на основании изложенного подхода, количественно соответствует экспериментальным данным (7).

Интересной проблемой, оставшейся пока не решенной, является характеристика степени нерегулярности решений. Модель допускает в

принципе возможность существования хаотических (в пространственном и пространственно-временном смысле) режимов. Сопоставление свойств (фазовых портретов) аттракторов, рассчитанных для экспериментальных данных и соответствующих численных решений, могло бы, по-видимому, дать наиболее глубокое представление о достоинствах и недостатках предложенной авторами модели динамики детонационного фронта.

ЛИТЕРАТУРА

1. Манжалей В. И. О тонкой структуре переднего фронта газовой детонации // ФГВ.— 1977.— 13, № 3.— С. 470—473.
2. Борисов А. А., Шарыпов О. В. Моделирование структуры неустойчивого фронта газовой детонации // Изв. СО АН СССР. Сер. техн. наук.— 1989.— Вып. 2.— С. 50—55.
3. Borisov A. A., Sharypov O. V. Modelling of gas detonation front structure // Flame Structure/Ed. O. P. Korobeinichev.— Novosibirsk: Nauka, 1991.— V. 2.— P. 408—411.
4. Зайдель Р. М. Об устойчивости детонационных волн в газовых смесях // Докл. АН СССР.— 1961.— 136, № 5.— С. 1142—1145.
5. Eggenbeck J. J. Stability of steady-state equilibrium detonations // Physics of Fluids.— 1962.— 5, № 5.
6. Пухначев В. В. Об устойчивости детонации Чепмена — Жуге // Докл. АН СССР.— 1963.— 149, № 4.— С. 798—801.
7. Зельдович Я. Б. Об одном эффекте, стабилизирующем искривленный фронт ламинарного пламени // ПМТФ.— 1966.— № 1.— С. 102—104.
8. Borisov A. A., Sharypov O. V. Physical model of dynamic structure of the surface of detonation wave // Dynamic Structure of Detonation in Gaseous and Dispersed Media/Ed. A. A. Borisov. Kluwer Acad. Publ., 1991.— P. 77—108.
9. Дьяков С. П. Об устойчивости ударных волн // ЖЭТФ.— 1954.— 27, № 3(9).— С. 288—295.
10. Войцеховский Б. В., Митрофанов В. В., Топчийн М. Е. Структура фронта детонации в газах.— Новосибирск, 1963.
11. Васильев А. А., Митрофанов В. В., Топчийн М. Е. Детонационные волны в газах // ФГВ.— 1987.— 23, № 5.

г. Новосибирск

УДК 536.46 + 534.222.2 + 661.215.1

Н. В. Банников, А. А. Васильев

ПЛОСКОЕ ИНИЦИИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ

Экспериментально исследованы условия возбуждения плоской детонационной волны. Обнаружена независимость процесса от начального давления. Объяснение этому основано на концепции о ведущей роли соударений поперечных волн в инициировании и распространении детонации. Размер эффективной зоны, ответственной за инициирование детонации, близок к размеру химика. Предложены формулы для оценки энергетического эквивалента инициатора, основанного на принципе трансформации плоской детонационной волны в сферическую, цилиндрическую или плоскую детонацию при дифракции исходной волны на выпуклом угле. Основные аналитические выводы концепции подтверждаются экспериментальными зависимостями.

Экологические и гуманитарные аспекты крупномасштабных катастроф привлекают внимание специалистов в области горения и взрыва. Одна из важнейших задач взрывобезопасности — определение критических условий инициирования горения и детонации во взрывчатой смеси. Заметные достижения в понимании механизма инициирования, к сожалению, не позволяют считать эту проблему решенной к настоящему времени. Наиболее многоплановым представляется случай инициирования за счет перехода низкоскоростного горения в детонацию (ПГД). Без четких физических представлений о механизме и параметрах ПГД трудно рассчитывать на адекватное описание этого процесса при численном моделировании.

© Н. В. Банников, А. А. Васильев, 1993.