

УДК 532.59:541.12

МОДЕЛЬ ВОЗНИКНОВЕНИЯ СПОНТАННЫХ ВЗРЫВНЫХ (ДЕТОНАЦИОННЫХ) ПРОЦЕССОВ

О.В. ШАРЫПОВ

Институт теплофизики СО РАН, Новосибирск

Обосновывается модель динамики возмущений малой, но конечной амплитуды в макроскопически однородных химически неравновесных системах с флуктуациями, находящихся вблизи порога самовоспламенения. Сформулирован критерий потери устойчивости однородного состояния системы, исследованы условия перехода от режима теплового взрыва к детонационному режиму процесса химического превращения. На основе представлений о коллективных эффектах в нелинейном кинетико-волновом взаимодействии проанализированы фундаментальные закономерности зарождения и развития спонтанных детонационных процессов.

Принадлежность реагирующих систем к так называемым системам синергетического типа (обладающим свойством самоорганизации) предполагает существование принципиальных критериев, определяющих условия сменяемости (бифуркации) типов процессов, отличающихся динамикой и пространственной симметрией (в частности, условия перехода от режима однородного теплового взрыва к детонационно-волновому). Любая модель, создаваемая для объяснения и описания процессов в данных системах, необходимо основывается на фундаментальном принципе Рэлея, состоящем в том, что малые случайные возмущения могут усиливаться при наличии положительной обратной связи (например, между тепловыделением реакции и давлением [1]). В отличие от описания динамики детонационных волн, опирающегося на модель идеальной реагирующей сплошной среды, изучение стадии зарождения волновых взрывных процессов должно учитывать действие факторов диссипации. Уровень потерь энергии наряду со степенью неравновесности экзотермической реакции определяет возможность самопроизвольного возникновения и развития неоднородностей, служащих очагами воспламенения в среде.

В работах [2 – 5] проанализированы условия самопроизвольного возникновения детонации в реакционноспособных системах. Обнаружена высокая чувствительность типов взрывных процессов к малым изменениям термодинамических и кинетических параметров среды (например, начальной температуры и коэффициента диссипации), характерная для точек бифуркации самоорганизующихся систем. Показано, что слабые (порядка одного процента) начальные возмущения однородного поля температуры (концентрации) системы, находящейся на пороге самовоспламенения, в зависимости от размера области неоднородности могут приводить к разнообразным режимам: взрыву при постоянном объеме с однородным повышением давления, самоподдерживающейся детонации в режиме Чепмена — Жуге, нестационарной детонации с предвестником, серии ударных волн. В то же время оказывается [6], что при учете коллективного волнового взаимодействия в среде размер неоднородностей не является определяющим фактором в отношении режима процесса.

Анализ известных результатов численного моделирования позволяет сделать вывод о том, что размер и амплитуда неоднородностей начальных параметров не имеют прямого отношения к фундаментальным закономерностям зарождения и развития спонтанных взрывных (детонационных) процессов в системах на пороге самовоспламенения. Объяснение физического механизма данного явления (как и формулирование критериев смены режимов), по видимому, следует строить на основе представлений о коллективных эффектах при нелинейном кинетико-волновом взаимодействии в реакционноспособных системах с флуктуациями.

Численное моделирование так называемого градиентного механизма возникновения детонации [2] демонстрирует возможность формирования волн, распространяющихся в заданном начальными данными направлении. Показано, что при некоторых условиях процесс приобретает характер детонационного. При этом основным определяющим параметром является значение градиента температуры (т. е. период индукции) в среде, задаваемое в качестве начальных данных. Известно, что при решении задач о самопроизвольном формировании тех или иных пространственных структур относительно слабое изменение параметров системы может весьма существенно отразиться на решении (не только количественно, но и качественно). Это общее свойство некорректных в смысле Адамара математических проблем, характерных для физических систем с неустойчивостью. Можно заключить, что в вышеупомянутых работах были смоделированы режимы, не являющиеся в полном смысле спонтанными, поскольку они требовали создания специальных (искусственных) исходных условий. В этом отношении представляется не вполне удачным введенный Я.Б. Зельдовичем [3] термин “спонтанное пламя” для обозначения процесса самовоспламенения в среде с неоднородным начальным распределением периода индукции химической реакции (в [7] для этого явления предложено иное название, а именно “индукционное пламя”). В настоящей работе изучается динамика спонтанных процессов в реакционноспособных системах исходя из макроскопически однородных начальных условий с наложенным слабым “шумом” во всем спектре возможных частот. Такая постановка задачи позволяет изучать общие закономерности явления. При этом градиентный механизм возникновения детонации оказывается частным случаем спонтанной эволюции реагирующей системы.

Для описания зарождения спонтанных детонационных процессов в системах на пороге самовоспламенения были использованы представления об эволюции плоских возмущений малой, но конечной амплитуды в реагирующих средах, развитые в работах [8, 9]. Представленная здесь новая модель в отличие от предшествующих результатов [8 – 11] свободна от предположения о медленном изменении решения (профиля волны) во времени, тем самым она пригодна для моделирования резкого (взрывного) изменения локальных значений параметров состояния среды.

Рассмотрим процесс распространения (эволюции) возмущения в химически активной газовой смеси. Волновое возмущение однородного состояния среды сжимает и адиабатически нагревает газ, ускоряя экзотермическую реакцию. Ограничимся рассмотрением одномерного случая, поскольку а) моделирование многомерных течений очень сложно даже для современной вычислительной техники, б) одномерный подход оказывается достаточно информативным для качественного описания и объяснения основных реальных физических механизмов процесса в самоорганизующихся системах, подобных рассматриваемой (например, одно- и двумерный подход обеспечивает важные результаты при изучении ряда физических явлений [12 – 14]). Одномерная модель может быть принята как основа для понимания и объяснения реальных многомерных процессов.

Данное явление описывается следующей системой уравнений:

уравнение состояния (в общем виде)

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{dp}{dt} \left[\left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_S \right]_f + \frac{dS}{dt} \left[\left(\frac{\partial \rho}{\partial S} \right)_p \right]_f + \frac{dY}{dt} \left(\frac{\partial \rho}{\partial Y} \right)_{S,p}, \quad (1)$$

уравнение кинетики химического превращения (в общей форме: реагенты \rightarrow продукты реакции)

$$\omega(S, p, Y) = \rho(S, p, Y) \frac{dY}{dt}, \quad (2)$$

уравнение производства энтропии (только за счет изменения химического потенциала, которым здесь нельзя пренебречь в отличие от случая равновесных систем)

$$\frac{dS}{dt} = \frac{q}{T} \frac{dY}{dt}, \quad (3)$$

уравнение неразрывности

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (4)$$

уравнение сохранения импульса

$$\rho \frac{du}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (5)$$

где ρ — плотность, p — давление, T — температура, S — энтропия, Y — массовая доля продуктов реакции, ω — скорость реакции, q — удельное тепловыделение реакции ($q = \text{const}$), индекс f соответствует условию $Y = \text{const}$ (реакция заморожена), u — массовая скорость среды, η — вязкость ($\eta = \text{const}$), t — время и x — пространственная координата.

Учитывая (2) и (3), уравнение (1) может быть записано в форме:

$$F(S, p, Y) = C_f^{-2} \frac{dp}{dt} - \frac{d\rho}{dt}, \quad (6)$$

где

$$F = \omega Q, \quad Q = \frac{q\rho\sigma_f}{c_{pf}} + \frac{\Delta v}{v}, \quad v = \rho^{-1}, \quad C_f^2 = \left[\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_S \right]_f, \quad c_{pf} = \left[\left(T \frac{\partial S}{\partial T} \right)_p \right]_f, \\ \sigma_f = \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_f.$$

Здесь C_f — скорость высокочастотных (“замороженных”) возмущений, c_p — удельная теплоемкость смеси при постоянном давлении ($c_{pf} = \text{const}$), σ — коэффициент температурного расширения смеси ($\sigma_f = \text{const}$), v — удельный объем газовой смеси, Δv — изменение удельного объема в результате реакции.

Используя (2) и (3), тождество $\frac{dF}{dt} = F_p \frac{dp}{dt} + F_S \frac{dS}{dt} + F_Y \frac{dY}{dt}$ может быть представлено следующим образом:

$$\frac{dF}{dt} = F_p \frac{dp}{dt} + \left(\frac{qF_S}{Q\rho T} + \frac{F_Y}{Q\rho} \right) F,$$

где

$$F_p = \left[\left(\frac{\partial F}{\partial p} \right)_S \right]_f, \quad F_S = \left[\left(\frac{\partial F}{\partial S} \right)_p \right]_f, \quad F_Y = \left(\frac{\partial F}{\partial Y} \right)_{S,p}.$$

Исключая F из последнего выражения с помощью (6), можно прийти к следующему уравнению состояния:

$$\frac{\tau}{N} C_f^2 \frac{d}{dt} \left[C_f^{-2} \frac{dp}{dt} - \frac{d\rho}{dt} \right] + \frac{dp}{dt} - C^2 \frac{d\rho}{dt} = 0, \quad (7)$$

где

$$N = (1 + L)(1 - \delta), \quad L = 1 + \frac{qF_S}{TF_Y}, \quad \delta = \frac{\tau F_p C_f^2}{1 + L}, \quad \tau = -\frac{Q\rho}{F_Y}, \quad C^2 = \frac{C_f^2}{1 - \delta},$$

$|\tau|$ и C играют роль характерного времени реакции и скорости низкочастотных (равновесных) возмущений в среде, L — безразмерный параметр, связанный с неравновесностью процесса, δ — безразмерный параметр химической дисперсии. В общем случае τ , C , L , N , δ являются переменными, определяемыми кинетическим уравнением (2). Уравнение состояния, подобное (7), впервые было получено в работе [8]. Ниже предполагается, что параметры химической дисперсии и химической неравновесности малы: $|\delta| \sim \varepsilon$, $|L| \sim \varepsilon$, где ε — малый параметр ($\varepsilon \ll 1$).

Чаще всего частные производные от F имеют определенные знаки: $F_S > 0$, $F_p > 0$, $F_Y < 0$. Как следствие, для обычной кинетической зависимости справедливы неравенства: $C^2 > C_f^2$ при $q > 0$ (т. е. для экзотермической реакции) и $C^2 < C_f^2$ при $q < 0$.

Если сжатие смеси слабой волной является адиабатическим, то скорость распространения волны может быть приближенно представлена первыми двумя членами ряда [15]:

$$C_f^2 = \left(1 + \frac{\gamma + 1}{2} \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \right) C_{f0}^2 + O(\varepsilon^2), \quad (8)$$

где $C_{f0}^2 = \gamma \frac{p_0}{\rho_0} = \text{const}$, $\frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} = O(\varepsilon)$, индекс 0 означает невозмущенное состояние среды, γ — показатель адиабаты смеси ($\gamma = \text{const}$).

Комбинация (7) и (8) дает уравнение, описывающее эволюцию слабой волны в реагирующей среде:

$$\begin{aligned} \frac{\tau}{N} C_{f0}^2 \left(1 + \frac{\gamma + 1}{2} \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \right) \frac{d}{dt} \left[C_{f0}^{-2} \left(1 + \frac{\gamma + 1}{2} \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \right)^{-1} \frac{dp}{dt} - \frac{d\rho}{dt} \right] + \\ + \frac{dp}{dt} - C^2 \left(1 + \frac{\gamma + 1}{2} \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \right) \frac{d\rho}{dt} + O(\varepsilon^3) = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Для перехода к безразмерной форме выражений удобно использовать следующие параметры: $\rho^* = \rho_0$, $u^* = C_{f0}$, $t^* = \tau_0$. Ниже предполагается, что

$\frac{\rho - \rho_0}{\rho^*} = \bar{\rho} = O(\varepsilon)$, $\frac{u}{u^*} = \bar{u} = O(\varepsilon)$, $\frac{p}{\rho^* u^{*2}} = \bar{p} = O(\varepsilon)$, $\frac{\eta}{\rho^* t^* u^{*2}} = \bar{\eta} = O(\varepsilon)$. Заме-

тим, что значение давления $\rho^* u^{*2}$ оказывается порядка десяти атмосфер.

Система обезразмеренных уравнений (4), (5), (9) является основой для вывода единственного уравнения, описывающего структуру и динамику возмущений малой, но конечной амплитуды. Для вывода такого уравнения будем пренебрегать слагаемыми выше второго порядка малости $O(\varepsilon^m)$, $m > 2$. Исключив из выражений (4), (5), (9) \bar{p} и \bar{u} , придем к следующему нелинейному интегро-дифференциальному уравнению для $\bar{\rho}$:

$$\begin{aligned} & \left(1 + \frac{\bar{\tau}}{N} \frac{\partial}{\partial \bar{t}}\right) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \left\{ \bar{\rho}(\bar{x}, \bar{t}) + \bar{\eta} \frac{\partial \bar{\rho}(\bar{x}, \bar{t})}{\partial \bar{t}} + \frac{\gamma+1}{4} \bar{\rho}^2(\bar{x}, \bar{t}) - \right. \\ & \left. - \int_0^{\bar{x}} \left[\int_0^{\bar{x}_1} \left[\frac{\partial^2 \bar{\rho}(\bar{x}_2, \bar{t})}{\partial \bar{t}^2} - 2 \left(\frac{\partial \bar{\rho}(\bar{x}_2, \bar{t})}{\partial \bar{t}} \right)^2 - 2 \frac{\partial^2 \bar{\rho}(\bar{x}_2, \bar{t})}{\partial \bar{t} \partial \bar{x}_2} \times \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. \times \int_0^{\bar{x}_3} \frac{\partial \bar{\rho}(\bar{x}_3, \bar{t})}{\partial \bar{t}} d\bar{x}_3 \right] d\bar{x}_2 \right) d\bar{x}_1 \right\} + \alpha \frac{\partial \bar{\rho}(\bar{x}, \bar{t})}{\partial \bar{t}} + O(\varepsilon^3) = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

где $\bar{x} = \frac{x}{u^* t^*}$, $\bar{t} = \frac{t}{t^*}$, $\bar{\tau} = \frac{\tau}{t^*}$, $\alpha = \frac{C^2}{u^{*2}}$. Как следствие предположения $|\delta| \sim \varepsilon$, имеем $|\alpha| \approx |\delta| = O(\varepsilon)$. Производные предполагаются имеющими следующий порядок малости: $\frac{\partial}{\partial \bar{t}}, \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \ll O(\varepsilon^{-1})$.

Следует подчеркнуть, что уравнение (10) выведено при условии малости амплитуд возмущений давления, плотности и скорости, но не содержит каких-либо предположений о нелинейности закона химической кинетики. Следовательно, (10), дополненное уравнением (2), должно достаточно точно описывать эволюцию волн малой (но конечной) амплитуды в среде с химической реакцией, кинетика которой подчиняется закону прои звольного вида.

Проанализируем уравнение (10) для случая волн, распространяющихся в одном направлении. Слабость дисперсии и диссипации позволяет применить метод медленного изменения профиля волны в сопровождающей системе координат: $y = \bar{x} - \bar{t}$, $\xi = \varepsilon \bar{t}$ (ξ — “медленное время”):

$$\frac{\partial}{\partial \bar{x}} = \frac{\partial}{\partial y}; \quad \frac{\partial}{\partial \bar{t}} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \bar{t}} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \bar{t}} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial y},$$

где $\frac{\partial}{\partial z} = O(\varepsilon)$.

Тогда уравнение (10) можно преобразовать к виду:

$$\left(1 - \frac{\bar{\tau}}{N} \frac{\partial}{\partial y}\right) \left\{ \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial z} - \frac{\bar{\eta}}{2} \frac{\partial^2 \bar{\rho}}{\partial y^2} + \Psi \bar{\rho} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial y} \right\} + \frac{\alpha}{2} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial y} + O(\varepsilon^3) = 0, \quad (11)$$

где $\Psi = 1 + \frac{\gamma+1}{4}$ — суммарный коэффициент гидродинамической и термодинамической нелинейности.

Для анализа свойств линеаризованного уравнения (11) исключим из него гидродинамическую, термодинамическую и химическую нелинейности: $\psi = 0, \bar{\tau} = 1, N = \text{const}, \alpha = \frac{C_0^2}{C_{f0}^2} - 1 = \text{const}$. Решение будем искать в виде суперпозиции невзаимодействующих гармоник:

$$\bar{\rho}_j = \sum_{j=0}^{\infty} r_j \exp(\Omega_j z + ik_j y).$$

Это приводит к дисперсионному соотношению

$$\Omega = \frac{\left(\frac{\alpha}{2N} - \frac{\bar{\eta}}{2}\right)k^2 - \frac{\bar{\eta}}{2N^2}k^4}{1 + \frac{k^2}{N^2}} - i \frac{\frac{\alpha}{2}k}{1 + \frac{k^2}{N^2}}. \quad (12)$$

Высокочастотный предел ($k^2 = O(\varepsilon^{-1})$) (реакция “заморожена”). В этом случае

$$\Omega \rightarrow -\frac{\bar{\eta}}{2}k^2. \quad (13)$$

Выражение (13) соответствует линейному пределу хорошо известного уравнения Бюргера, которое описывает распространение волн в химически инертных диссипативных средах. Согласно (13), линейные возмущения распространяются в среде с “замороженной” скоростью звука C_{f0} и ослабляются за счет диссипации энергии.

Низкочастотный предел ($k^2 = O(\varepsilon)$). В этом случае химическая реакция существенно влияет на эволюцию линейных возмущений:

$$\Omega = \left(\frac{\alpha}{2N} - \frac{\bar{\eta}}{2}\right)k^2 - i \frac{\alpha}{2}k. \quad (14)$$

Зависимость (14) также соответствует линеаризованному уравнению Бюргера, но скорость волн здесь равна равновесной скорости звука, и коэффициент при второй производной $\left(\frac{\alpha}{2N} - \frac{\bar{\eta}}{2}\right)$ может быть как отрицательным, так и положительным. Последнее означает возможность усиления низкочастотных возмущений, которое имеет место, если эффект тепловыделения реакции преобладает над диссипацией энергии:

$$\frac{\alpha}{N} > \bar{\eta}. \quad (15)$$

Величина $\bar{\eta}$ в данной модели может рассматриваться как обобщенный коэффициент диссипации энергии (связанный не только с вязкостью, но и с теплопроводностью, излучением и т. п.).

Согласно эволюционному уравнению (11), нелинейное взаимодействие между гармониками может “перекачивать” энергию от неустойчивых низкочастотных возмущений к затухающим высокочастотным. В результате возможно установление стационарного спектра решения. Подобный механизм стабилизации решения известен для ряда задач, относящихся к теории самоорганизации. В качестве примера здесь можно назвать структуру фронта ламинарного пламени, поверхность пленки жидкости, стекающей по наклонной плоскости, поверхность твердого тела, сублимируемого с помощью лазерного

излучения, структуру фронта затвердевания слабых бинарных растворов, многомерную газовую детонацию и др. Все эти явления сопровождаются появлением так называемых диссипативных структур, которые существуют в стационарном режиме благодаря энергообмену со средой, причем затухание высокочастотных гармоник обеспечивается различными физическими механизмами: теплопроводностью, поверхностным натяжением, вязкостью и т. д.

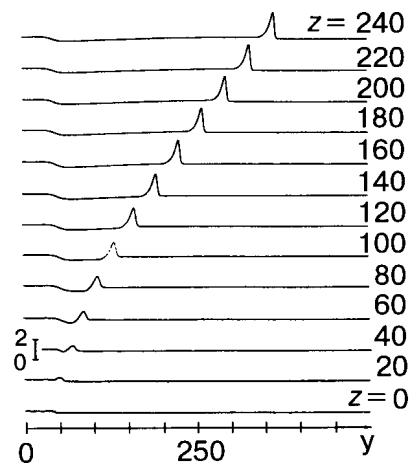
Несмотря на относительную простоту нелинейного уравнения (11), его аналитическое решение найти не удастся (даже в случае $N = \text{const}, \alpha = \text{const}$).

Аналитические решения известны лишь для существенно более простых уравнений с нелинейностью данного типа (т. е. типа нелинейности уравнения Бюргера): для уравнений Бюргера, Кортевега — де Вриза, уравнения Кортевега — де Вриза — Бюргера, Курамото — Сивашинского [16, 17]. Поэтому дальнейшее исследование решений уравнения (11) требует применения методов численного моделирования.

В [10] на основе уравнения (11) численно моделировался процесс спонтанного формирования квазистационарной уединенной автоволны (волны детонации). В качестве начального условия использовалось тривиальное решение с наложенным на него слабым возмущением в форме “бегущей ступеньки” (ударной волны) (см. рисунок). Выполненные в [10] расчеты показали, что полученная модель (11), (2) действительно допускает возможность спонтанной генерации макронеоднородностей в химически реагирующих системах без создания специальных начальных условий с макроскопическим градиентом периода индукции. Научный интерес к процессам самовоспламенения в настоящее время продолжает оставаться высоким. Новые результаты экспериментов [18] подтверждают адекватность применения модели (11), (2) к описанию особенностей развития процессов мягкого и жесткого режимов самовоспламенения за ударной волной.

Необходимо отметить, что наличие ударной волны не позволяет считать процесс в полном смысле спонтанным, а систему однородной. Поэтому результаты работы [10] не могут непосредственно описать механизм спонтанной генерации детонационных волн в находящихся на пороге самовоспламенения однородных системах со случайными микроскопическими возмущениями. В зависимости от амплитуды возмущений и степени отклонения системы от условий химического равновесия фактическое время нарастания неоднородностей в рамках модели (11), (2) может существенно превышать характерное время реакции в невозмущенной среде ($\sim \tau_0$). Это означает, что согласно модели должен реализовываться мягкий режим самовоспламенения (относительно медленный и без образования детонационных волн). Ясно, однако, что это предсказание может быть в принципе неверным благодаря недостатку модели (11), (2), связанному с тем, что в ней отсутствует учет столкновения встречных волн, которое вместе с сильной нелинейной кинетической зависимостью скорости реакции от температуры приводит к резкому ускорению развития неоднородностей и их превращению в детонационные волны.

Новая модель (10), (2) описывает плоские волны, распространяющиеся в обоих направлениях, благодаря чему она учитывает эффект столкновения волн, который имеет важное значение для генерации зон с относительно высокой скоростью реак-



Моделирование спонтанного развития стационарной детонационной волны.

ции и повышенным тепловыделением. Следует подчеркнуть, что в этом и заключается физический механизм ускорения спонтанной генерации макрон неоднородностей конечной амплитуды в изначально однородных средах с малыми случайными возмущениями параметров состояния.

Важным достоинством модели (10), (2), по сравнению с прямым численным моделированием, является ее “прозрачность”, позволяющая делать общие качественные физические выводы и производить количественные оценки, избегая большого объема вычислений, чрезмерных затрат компьютерного времени и усилий программистов. Относительная простота полученной модели (10), (2) позволяет предсказать качественный сценарий (физический механизм) динамики предварительно нагретой реагирующей системы, находящейся на пороге самовоспламенения. Малые хаотические возмущения однородного начального поля плотности смеси (или концентрации реагентов) связаны с возмущениями поля температуры и давления. Малые флуктуации температуры вызывают значительные изменения периода индукции реакции (благодаря экспоненциальному характеру закона кинетики реакции). Если локально выполняется критерий (15), то начинается усиление квазилинейных возмущений (с волновым числом $k \approx k_*$)*, что приводит к формированию системы слабых ударных волн. Эти волны испытывают последовательные соударения и порождают “точки” с повышенными значениями параметров состояния. Таким образом, неустойчивость системы (т. е. положительная обратная кинетико-волновая связь) и коллективное взаимодействие между генерируемыми неоднородностями приводят к режиму распределенного детонационного взрыва.

Задание в качестве начального условия какого-либо градиента периода индукции в системе не является в этом случае необходимым. Данный вывод может быть подтвержден тщательным анализом результатов прямых расчетов [6], выполненных для начальных условий, включающих градиент температуры или концентрации. Эти расчеты показали, что характерная длина растущей волны давления (или температуры) λ_* ($\lambda_j = 2\pi/k_j$) на начальном этапе (т. е. на квазилинейной стадии эволюции) не зависит от пространственного размера привносимой неоднородности λ_0 . Во всех численных экспериментах при $\lambda_0 \geq \lambda_*$ наблюдается детонационный режим, однако при $\lambda_0 < \lambda_*$ характер процесса резко изменяется: детонация замещается режимом ламинарного горения. Это может быть объяснено на основе модели (10), (2). Отсутствие детонации связано с искусственным исключением (подавлением) длинноволновых гармоник из начального спектра возмущения. В свою очередь, высокочастотные гармоники $\lambda \leq \lambda_0 < \lambda_c$ (присутствующие в начальных условиях) затухают благодаря диссипативным свойствам среды, приводя к тепловому и диффузионному “расплыванию” области неоднородности. Это “расплывание” означает постепенное проявление в спектре решения низкочастотных гармоник $\lambda \geq \lambda_c$, которые неустойчивы и спонтанно усиливаются вплоть до макроскопического уровня. Вместе с тем время такого процесса может оказаться слишком велико по сравнению с периодом индукции в невозмущенной области τ_0 . Тем самым детонация в системе не возникает, и через время порядка τ_0 происходит однородный взрыв. В численных расчетах [6] нелинейное коллективное взаимодействие неоднородностей не рассматривалось, однако можно ожидать, что оно способно привести к детонационному режиму (при опред-

* Здесь $k_*^2 \approx N^2 \left(\frac{\alpha}{N} - \bar{\eta} \right) / 2\bar{\eta} = k_c^2 / 2$, индексы * и c означают критическую и наиболее неустойчивую

гармоники.

ленных условиях) даже в случае, когда неустойчивые гармоники ($\lambda \geq \lambda_c$) существенно подавлены в момент $t = 0$.

В заключение отметим, что полученная модель описывает распространение в системе плоских волн, ускоренно эволюционирующих от бесконечно малых (звуковых) возмущений до слабых нестационарных ударных волн благодаря нелинейности и положительной обратной связи между изменением параметров состояния и скоростью тепловыделения реакции. Подобное поведение решения качественно соответствует явлению спонтанного зарождения детонационных взрывов в реагирующих системах, находящихся на пороге самовоспламенения. Учет в модели диссипации энергии позволяет сформулировать определенные количественные критерии самопроизвольного отклонения системы от режима однородного взрыва: а) протекающая химическая реакция должна быть достаточно далека от равновесия (условие (15), при выполнении которого слабые длинноволновые возмущения оказываются растущими во времени); б) размер системы должен превышать критическую длину волны λ_c . Эти критерии позволяют объяснить успех феноменологических концепций, отводящих главную роль в спонтанном возникновении детонационного режима геометрическому размеру начальной неоднородности параметров системы (размеру “зародыша”, или “очага”, воспламенения). Учет в предложенной модели встречного распространения и столкновений возмущений в рассматриваемой системе позволяет моделировать резкое локальное ускорение реакции и формирование сильных ударных волн, благодаря чему может быть описан переход системы к детонационному взрывному режиму без использования специального макроскопического пространственного распределения начальной температуры (концентрации)*. Последнее логически объединяет противоположные концепции [6, 20] описания спонтанных взрывных процессов: детерминистический подход на стадии развития макронеоднородностей дополняется вероятностным благодаря использованию стохастических бесконечно малых (“шумовых”) возмущений начального состояния системы.

Предложенная модель может дать положительный эффект в экономии усилий, требуемых для натурального и компьютерного моделирования технологических процессов, поскольку ее применение обеспечивает общее понимание физической сущности этих процессов, а также компактность математической модели и наличие критериев для ее количественных оценок.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (Грант № 96-02-19193).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Арьков О.Ф., Войцеховский Б.В., Митрофанов В.В., Топчий М.Е. О спиновой детонационной природе тангенциальных высокочастотных колебаний в камерах сгорания ЖРД // Журнал прикладной механики и технической физики. — 1970. — № 1. — С. 155 – 157.
2. Зельдович Я.Б., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М., Сивашинский Г.И. О возникновении детонации в неравномерно нагретом газе // Там же. — 1970. — № 2. — С. 76 – 84.
3. Zel'dovich Ya.B. Regime classification of an exothermic reaction with non-uniform initial conditions // Combustion and Flame. — 1980. — Vol. 39. — P. 211 – 214.
4. Гельфанд Б.Е., Поленов А.Н., Фролов С.М., Цыганов С.А. Возникновение детонации в неоднородно нагретой газовой смеси // Физика горения и взрыва. — 1985. — Т. 21, № 4. — С. 118 – 123.
5. Гельфанд Б.Е., Фролов С.М., Поленов А.Н., Цыганов С.А. Возникновение детонации в областях с неоднородным распределением температуры и концентрации // Физика горения и взрыва. — 1988. — Т. 24, № 6. — С. 101 – 106.
6. Фролов С.М. Эффекты неидеальности при зарождении и распространении взрыва — Дисс. ... д-ра ф.-м.н. — М., ИХФ РАН. — Москва, 1992.

* В результате взаимодействия сталкивающихся фронтов горения в кислородных смесях наблюдались процессы зарождения детонации (“взрыва внутри взрыва”) [19].

7. **Dold J.W., Kapila A.K.** Comparison between shock initiations of detonation using thermally-sensitive and chain-branching chemical models // *Combustion and flame*. — 1991. — Vol. 85, No. 1–2. — P. 185–194.
8. **Накоряков В.Е., Борисов А.А.** Распространение возмущений в релаксирующей или химически реагирующей среде // *Физика горения и взрыва*. — 1976. — Т. 12, № 3. — С. 414–422.
9. **Борисов А.А., Шарыпов О.В.** К вопросу о механизме возникновения спонтанных взрывных процессов // *Там же*. — 1993. — Т. 29, № 5. — С. 105–106.
10. **Borissov A.A., Sharypov O.V.** Self-sustained solitary waves in non-equilibrium media // *J. Fluid Mech.* — 1993. — Vol. 257. — P. 451–461.
11. **Borissov A.A., Sharypov O.V.** On the mechanism of spontaneous explosion occurrence / Proc of the Russian-Japanese Seminar on Combustion. Chernogolovka, Moscow Reg., October 2–5 1993. — The Rus. Sect. of the Combustion Institute, 1993. — P. 209–210.
12. **Борисов А.А., Кравченко А.Г., Шарыпов О.В.** Нелинейная модель динамики фронта кристаллизации слабых растворов // *Докл. РАН*. — 1992. — Т. 324, № 4. — С. 777–782.
13. **Borissov 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. Borissov. — Netherlands: Kluwer Acad. Publ., 1991. — P. 77–108.
14. **Минаев С.С., Пирогов Е.А., Шарыпов О.В.** Скорость распространения пламени при развитии гидродинамической неустойчивости // *Физика горения и взрыва*. — 1993. — Т. 29, № 6. — С. 19–25.
15. **Накоряков В.Е., Покусаев Б.Г., Шрейбер И.Р.** Волновая динамика газо- и парожидкостных сред. — М.: Энергоатомиздат, 1990. — 248 с.
16. **Кудряшов Н.А.** Точные решения нелинейных волновых уравнений в механике // *Прикл. математика и механика*. — 1990. — Т. 54, № 3. — С. 450–453.
17. **Минаев С.С.** Набор стационарных решений, описывающих ячеечное пламя в случае гидродинамической неустойчивости // *Физика горения и взрыва*. — 1992. — Т. 28, № 1. — С. 35–39.
18. **Гельфанд Б.Е., Медведев С.П., Поленов А.Н. и др.** Основные режимы самовоспламенения и условия их реализации в горючих газовых смесях // *Там же*. — 1997. — Т. 33, № 2. — С. 3–10.
19. **Субботин В.А.** Влияние зазоров на процессы возбуждения детонации газовых смесей в цилиндрических камерах сгорания. I. Очаги псевдовоспламенения и спонтанные пламена // *Там же*. — 1997. — Т. 33, № 2. — С. 86–97.
20. **Федотов С.П.** Флуктуации и автоколебания в химически реагирующих системах. — Дисс. ... д-ра ф.-м.н. — Екатеринбург, УПИ, 1993.

Статья поступила в редакцию 8 декабря 1997 г.