

УДК 534.222.2+536.46+661.215.1

МОНОТОПЛИВО КАК ИСТОЧНИК БИФУРКАЦИОННЫХ СВОЙСТВ МНОГОТОПЛИВНЫХ СИСТЕМ

А. А. Васильев

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, gasdet@hydro.nsc.ru

Представлены дополнительные данные о параметрах детонации монотопливных компонентов, обладающих положительным энерговыделением при разложении. Такие вещества, будучи добавлены в горючую смесь, могут обеспечить развитие неустойчивостей непосредственно на головном фронте детонационной волны. При этом энерговыделение смеси становится двухстадийным. Как основная, так и бифуркационная структуры возникают скачкообразно (спонтанно), что слабо согласуется с гипотезой о постепенном усилении слабых возмущений, принятой при численном моделировании ячеистых структур.

Ключевые слова: многотопливные системы, бифуркационные структуры детонации.

ВВЕДЕНИЕ

Традиционно горючая система рассматривается как смесь топливного компонента (горючее), окислителя и инертного разбавителя. Основной особенностью горючей смеси является то, что решение совместной системы уравнений газодинамики и химической кинетики, описывающее распространение волн в химически активных газовых смесях, неустойчиво. В силу неустойчивости фронта детонационной волны (ДВ), в таких динамических системах наблюдаются возникновение и развитие возмущений, их самоорганизация, возникновение упорядоченной (регулярной) структуры. На рис. 1, *a* приведен типичный для газовых горючих смесей следовой отпечаток многофронтной ДВ с характерной ромбовидной формой элементарной ячейки.

Многочисленные экспериментальные исследования позволили провести классификацию степени регулярности ячеек классического типа: 1) идеально регулярные, когда все ячейки имеют практически одинаковую форму и размер; 2) квазирегулярные, когда форма и размер ячейки несколько отличаются друг от друга (их можно рассматривать как промежуточные структуры при перестройке регулярных структур с одного масштаба на другой);

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 11-01-00634а), Сибирского отделения РАН в рамках программы Президиума РАН № 26 «Горение и взрыв» и ведущей научной школы РФ «Механика ударных и детонационных процессов».

© Васильев А. А., 2014.

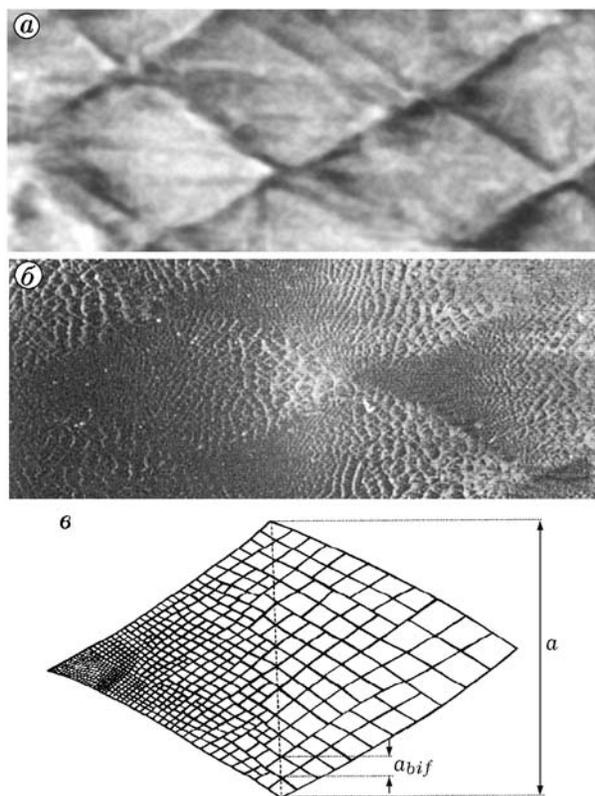


Рис. 1. Следовые отпечатки многофронтной детонации:

a — классическая одномерная ячеистая структура, *b*, *б* — «бифуркационная» многомерная структура и идеализированная схема ее расшифровки; распространение ДВ слева направо

3) слаборегулярные, характеризующиеся заметным разбросом размеров индивидуальных ячеек; 4) нерегулярные, когда практически невозможно выделить доминантную форму ячейки, а ее размер определяется формальным средним значением. При этом считалось, что в химически активной смеси из нескольких горючих компонентов (многотопливные системы) формируется некоторый осредненный тип структуры ДВ, подпадающий под вышеприведенную классификацию, даже если система многопараметрична. Наиболее полный обзор исследований и современных результатов о детонационной ячейке представлен в [1, 2].

Регулярность ячеек связана с параметром E/RT : чем выше значение E/RT , тем более нерегулярны ячейки и больше разброс размеров индивидуальных ячеек (E — энергия активации лидирующей реакции индукционного периода, T — температура в зоне индукции одномерной ДВ, R — газовая постоянная). Напомним, что размер ячейки a является базовым масштабом структуры многофронтной ДВ [1, 2] и отображает протяженность зоны реакции. Во многих приложениях через размер ячейки a определяются минимальные размеры канала, в котором может распространяться детонационный процесс, а также критическая энергия инициирования детонации, скорость и размеры быстролетящего тела, необходимые для возбуждения детонационного режима сгорания смеси и т. д.

Под вышеприведенную классификацию не подпадают новые ячеистые структуры ДВ, содержащие одновременно крупно- и мелкомасштабные возмущения (рис. 1, б), называемые двухразмерными или бифуркационными. Впервые двухразмерные структуры наблюдались в [3] при детонации смеси газообразный нитрометан — кислород ($\text{CH}_3\text{NO}_2\text{—O}_2$). Затем подобные структуры были обнаружены в смесях водород — оксиды азота ($\text{H}_2\text{—NO}_2/\text{N}_2\text{O}_4$) [4], ацетилен — кислород — закись азота ($\text{C}_2\text{H}_2\text{—O}_2\text{—N}_2\text{O}$) [5, 6], аммиак — кислород — закись азота (или перекись водорода) [7, 8]. Отметим, что в смесях аммиак — кислород без дополнительного топливного компонента регистрируемая в экспериментах ячеистая структура относится к нерегулярным по вышеприведенной классификации и непохожа на двухмасштабную структуру. И лишь при добавлении перекиси водорода или закиси азота наблюдаемые структуры становятся похожими на бифурка-

ционные (см. рис. 1, б).

По мнению авторов [3, 4], эффект двухмасштабности ячеек в исследованных ими системах связан со специфическим воздействием оксидов азота, а именно с двумя реакциями, заметно различающимися по времени индукции: быстрая реакция $\text{NO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{NO} + \text{OH}$ и медленная $\text{NO} + \text{NO} \rightarrow \text{N}_2 + \text{O}_2$.

В отличие от идеи [3, 4] о главенствующей роли оксидов азота в образовании бифуркационных структур, предположение [5, 6] основано на том, что подобные двухразмерные ячеистые структуры возможны во многих системах (при определенных условиях), где один из присутствующих топливных компонентов разлагается с экзотермическим эффектом. Такие вещества обеспечивают начальную стадию выделения энергии и развитие неустойчивости непосредственно на головном фронте ДВ, перед стадией основного энерговыделения смеси (рис. 2, 3).

Следует особо подчеркнуть, что используемые в [3, 4] компоненты (газообразные нитрометан и оксиды азота) не только обеспечивают

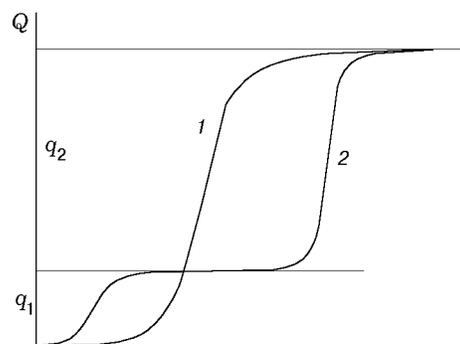


Рис. 2. Идеализированные профили монотонного энерговыделения в монотопливной системе (линия 1) и двухстадийного энерговыделения в многотопливной смеси (линия 2)

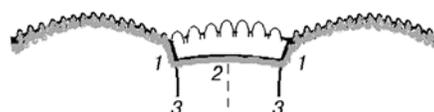


Рис. 3. Идеализированная схема переднего фронта ДВ с мелкомасштабными возмущениями на различных участках фронта:

1 — основные поперечные волны, 2 — зона основного энерговыделения, 3 — шлейфы в продуктах детонации

появление в ходе реакций специфических радикалов, но и сами являются компонентами с положительным энерговыделением при разложении. Другими словами, гипотеза [5, 6] носит более общий характер, чем гипотеза [3, 4].

В дальнейших публикациях [9, 10] авторы работ [3, 4] не исключают, но и не настаивают на своей первоначальной гипотезе о главенствующей роли оксидов азота, сосредоточив основное внимание на гипотезе о необходимости двухстадийного энерговыделения в ДВ (см. рис. 2) для существования двухмасштабных ячеистых структур. Была предложена упрощенная двухстадийная модель энерговыделения и с ее помощью смоделированы качественные закономерности двухмасштабных структур [9, 10].

Каких-либо рекомендаций об алгоритме выбора веществ, обеспечивающих эффект двухстадийного энерговыделения, в [3, 4, 9, 10] не предложено.

Цель данной работы состоит в выявлении общих закономерностей поведения бифуркационных структур и выработке рекомендаций по их обнаружению в многотопливных газовых смесях. Если воспользоваться схемой расшифровки, представленной на рис. 1, в, то станет ясно, что речь идет даже не о двухмасштабной, а о многомасштабной структуре детонационного фронта. Природа таких режимов, область существования, структура, параметры и т. д. представляются чрезвычайно интересными как для экспериментаторов, так и для теоретиков. На сегодняшний день имеются лишь единичные публикации по данной проблеме.

ТЕРМОДИНАМИКА ГОРЮЧИХ СМЕСЕЙ С БИФУРКАЦИОННЫМИ СВОЙСТВАМИ

В рамках базовой гипотезы [5] о природе двухмасштабной структуры ячеистых отпечатков, предусматривающей обязательное наличие в двухтопливной системе компонента с положительным тепловым эффектом при его разложении, в противовес гипотезе [3, 4] об особой роли оксидов азота, проведен целенаправленный поиск новых топлив, при добавлении которых к обычным горючим смесям следует ожидать проявления этого эффекта.

Выполнен анализ термодинамических данных по различным веществам, обладающим положительным энерговыделением при разложении (называемым монотопливами). В табл. 1 представлены некоторые данные о

параметрах детонации выбранных веществ: скорость детонации D_0 , давление p_d , температура T_d продуктов, энерговыделение при разложении вещества Q_d , число Маха ДВ M_0 , давление p_{sw} и температура T_{sw} во фронте ДВ (в зоне индукции). Список веществ с $Q > 0$ не ограничивается приведенными в таблице.

ВОЗНИКНОВЕНИЕ ЯЧЕИСТЫХ СТРУКТУР

На рис. 1, б четко видно, что области соударения основных продуктов взрыва служат началом как крупных, так и мелких ячеек. Рассматривая поведение детонационных ячеек при формировании бифуркационных структур (схема на рис. 1, в), можно отметить, что мелкомасштабная структура ДВ меняет свой размер, увеличиваясь по мере удаления от области соударения основных поперечных волн. Идеализированная схема разномасштабных неустойчивостей на различных участках фронта ДВ в смесях с бифуркационными свойствами представлена на рис. 3, основные поперечные волны отмечены цифрой 1.

Нестационарное поведение бифуркационных ячеек (см. рис. 1, в) весьма похоже на поведение ячеек при инициировании детонации. На рис. 4 представлены следовые отпечатки, иллюстрирующие возникновение ячеистой структуры в расширяющейся цилиндрической волне при инициировании ДВ, а также в процессах пульсационного характера (околопредельная и галоширующая ДВ). Отметим основные особенности.

1. Возбуждение горения или детонации, а также переход горения в детонацию обычно носят «пороговый» характер (да — нет) для любого инициатора.

2. Общепринято, что минимальная энергия, обеспечивающая 100%-е возбуждение данного режима, называется критической энергией.

3. Критическая энергия зажигания (во всяком случае, при искровом воспламенении) традиционно считается основным параметром пожарной опасности смеси.

4. Критическая энергия идеального по пространственно-временным характеристикам инициатора детонации служит мерой детонационной опасности смесей.

5. Вблизи инициатора детонации взрывная волна сильно пересжата и ячеистая структура не фиксируется, затем скачкообразно (спонтанно) возникает большое количество поперечных

Таблица 1

Вещество	D_0 , м/с	p_d , атм	T_d , К	Q_d , кал/г	M_0	p_{sw} , атм	T_{sw} , К
H_2O_2 (перекись водорода)	1 904	23.4	2 539	720	6.38	45.9	1 340
O_3 (озон)	1 915	33.1	3 469	587	7.53	64.9	1 931
NO (оксид азота)	1 913	20.8	3 350	564	5.61	37.9	1 881
N_2O (закись азота)	1 699	23.4	2 614	433	6.36	46.7	1 498
N_2H_4 (гидразин)	2 482	34.9	1 992	814	8.15	75.5	1 464
CH_6N_2 (метилгидразин)	1 938	33	1 633	690	7.84	67.2	1 039
$C_2H_8N_2$ (1,1-диметилгидразин)	1 696	33.3	1 502	642	7.99	67.7	871
$C_2H_8N_2$ (1,2-диметилгидразин)	1 710	33.9	1 518	651	8.02	68.8	895
$C_3N_{10}N_2$ (триметилгидразин)	1 557	34.8	1 420	606	8.19	70.7	803
CH_4O (метанол)	1 327	11.1	964	275	3.64	21	763
C_2H_6O (этанол)	1 158	12.2	886	239	4.49	23.6	652
C_3H_8O (пропанол)	1 034	12.7	773	183	4.75	24.9	589
C_2H_4O (оксид этилена)	1 593	21.5	1 507	522	6.09	42.7	945
C_3H_6O (оксид пропилена)	865	8.8	717	140	3.87	16.6	539
C_2H_4O (ацетальдегид)	1 070	10	874	189	3.93	19	656
C_4H_4O (фуран)	877	10.5	980	245	4.26	20.1	577

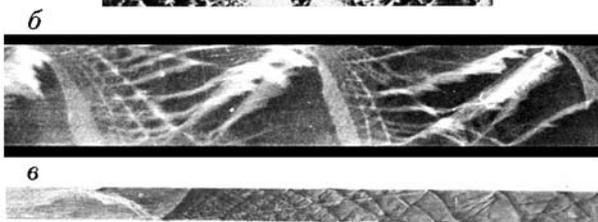


Рис. 4. Нестационарная мелкомасштабная структура при инициировании многофронтной (а), околораздельной (б) и галопирующей (в) детонации:

структура возникает на стадии выхода из пережатия и увеличивается по мере удаления от точки возбуждения детонации

волн (мелкие ячейки) (см. фотографии ячеистых структур на рис. 4).

б. На последующем этапе ослабления сильно пережатой взрывной волны коли-

чество поперечных волн даже уменьшается (ячейки укрупняются), пока не происходит переход к самоподдерживающемуся режиму распространения ДВ с квазипостоянным масштабом детонационных ячеек (штриховая линия на рис. 5). Именно по квазипостоянному масштабу и проведена классификация регулярности ячеек (см. вышесказанное).

Проблема возникновения ячеистой структуры и формирования многофронтной ДВ чрезвычайно важна в ряде экспериментальных постановок, моделирование которых вызывает большие затруднения даже для современных многопроцессорных компьютеров. Среди подобных задач — расходящиеся волны, ячеистые структуры ДВ различного типа (включая бифуркационные), инициирование горения и детонации и его оптимизация, переход горения в детонацию, детонационное горение в сверхзвуковых потоках (в том числе, при стратификации смеси), природа критического диаметра (или слоя), дифракция волн горения и детонации, распространение в каналах сложной геометрии (криволинейных, перфорированных, разветвленных). Основная цель экспериментальных исследований и численного мо-

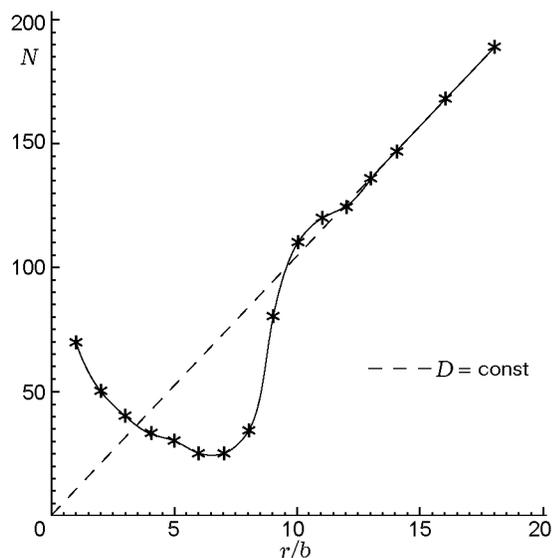


Рис. 5. Количество ячеек на фронте ДВ ($N = 2\pi r/a$) в зависимости от радиуса расходящейся волны (нормированного на продольный размер ячейки)

делирования — определение условий и физических механизмов срыва и реинициирования волн горения и детонации.

Впечатляющие достижения современной многопроцессорной компьютерной техники, казалось бы, позволяют считать задачу о многофронтной структуре ДВ решенной. Однако это не совсем верно. Дело в том, что при численном моделировании детонационных процессов на основе уравнений газодинамики и химической кинетики (чаще всего сильно упрощенных) следует четко разделять решаемые задачи. Одни касаются инициирования смеси и формирования нестационарной ячеистой структуры фронта ДВ, другие — структуры установившегося течения. В обоих случаях традиционным является подход, основанный на принципе постепенного усиления «слабых» возмущений за фронтом инициирующей ударной волны при решении нестационарной задачи (рис. 6) (в двумерной и даже трехмер-



Рис. 6. Расчетная динамика постепенного усиления «слабых» возмущений за фронтом ударной волны и формирование «ячеистой» структуры в канале постоянного сечения (двумерный расчет)

ной постановке). В качестве начала формирования «ячеистой» структуры обычно принимается момент, когда амплитуда возмущений возрастает до некоторой величины, достаточной для «вычерчивания» своей траектории. Тогда границами «ячеек» являются фазовые траектории возмущений с максимальной амплитудой, распространяющихся в противоположных направлениях.

Хочется сразу же обратить внимание на одну особенность картины расчета, представленной на рис. 6: уже в момент появления структуры характерный размер счетной ячейки лишь незначительно отличается от своей установившейся величины. В то же время в экспериментах (см. фотографии на рис. 4) размер ячейки при возникновении структуры и размер в режиме самоподдерживающейся ДВ различаются весьма заметно.

Поскольку эффекты самоорганизации позволяют установившемуся решению «забыть» начальные условия, такое решение нечувствительно к изменению амплитуды и формы слабого начального возмущения (в некотором достаточно широком диапазоне). Это позволяет при численном моделировании для сокращения «выхода» на стационарный режим (задачи второго типа) с самого начала задавать возмущения «конечной» амплитуды либо «вводить» формальную, экспоненциально нарастающую зависимость амплитуды возмущений от времени. Потому в задачах второго типа не следует искать соответствия с реальным экспериментом по таким параметрам, как время и дистанция формирования ячеистой структуры, а в задачах первого типа (об инициировании ДВ) не следует обращаться столь произвольно с концепцией постепенного усиления «слабых» возмущений за фронтом инициирующей ударной волны, как это делается при решении задач второго типа. В первую очередь это касается корректного моделирования начальной стадии формирования ячеистой структуры.

Для задач обоих типов определяющую роль в развитии неустойчивости при численном моделировании играют форма границ канала и взаимодействие возмущений со стенками, а схожесть расчетных картинок с экспериментальными достигается лишь в каналах постоянного сечения. Что даст модель постепенного усиления возмущений для случая расходящейся волны? Возникнут ли ячеистые структуры при моделировании расходящейся

волны? По этому поводу имеются лишь единичные публикации (например, [11–15]). Возникновение упорядоченной самосогласующейся структуры в сильных волнах при их ослаблении представляет одну из фундаментальных проблем сложных газодинамических течений, сопровождаемых химическими реакциями с немонотонным энерговыделением.

Спонтанное возникновение неоднородностей на фронте сильной ударной волны (УВ) экспериментально было зафиксировано в [16]. Базовой идеей такого эксперимента служили два известных результата: устойчивость УВ в инертной среде ($Q = 0$) и неустойчивость ДВ в реагирующей среде ($Q > 0$). Логично предположить, что момент спонтанного возникновения неустойчивостей связан с моментом перехода тепловыделения смеси через нулевое значение. На начальном этапе, когда энерговыделение смеси много меньше энергии инициатора, взрывная волна, по сути, является ударной ($Q \approx 0$) и превращается в детонационную ($Q > 0$) на некотором удалении от инициатора. Поэтому, создавая сильные УВ, распространяющиеся по горючей смеси, можно «поймать» момент перехода через $Q = 0$ и момент возникновения неоднородностей на фронте затухающей УВ. Именно такой оригинальный эксперимент был выполнен в [16], и установлено, что для смесей $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 + 2\text{Ar}$ и $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 3\text{Ar}$ ячеистая структура в затухающей УВ возникает при скорости ДВ, соответствующей точке пересечения равновесной адиабаты продуктов детонации и замороженной ударной адиабаты исходной смеси. Однако для других исследованных смесей ($\text{C}_2\text{H}_2 + 2.5\text{O}_2$, $2\text{C}_2\text{H}_2 + 3\text{O}_2 + 15\text{Ar}$ и т. п.) данное правило (т. е. $Q = 0$, где Q — равновесное значение энерговыделения смеси при детонации) не подтвердилось, потому нужны новые исследования этой важнейшей проблемы — возникновения структуры ДВ.

В табл. 2 приведены результаты расчета степени пересжатия M/M_0 , при котором $Q = 0$ (M_0 — число Маха ДВ). Критическое число Маха соответствует гиперзвуковым скоростям.

Поскольку используемая при моделировании базовая идея о возникновении структуры за счет постепенного усиления слабых возмущений слабо согласуется с экспериментально наблюдаемым эффектом скачкообразного возникновения ячеек в ДВ, то нужно искать альтернативную причину. Одной из причин может быть переизлучение возбужденных молекул

Таблица 2

Смесь	$(M/M_0)_{Q=0}$	M_0
$2\text{H}_2 + \text{O}_2$	1.83	5.28
$\text{CH}_4 + 2\text{O}_2$	1.85	6.67
$\text{C}_2\text{H}_2 + 2.5\text{O}_2$	1.85	7.34
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 3\text{Ar}$	1.56	5.09
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 7\text{Ar}$	1.48	4.85
$\text{C}_2\text{H}_2 + 2.5\text{O}_2 + 10.5\text{Ar}$	1.47	5.58
$\text{H}_2 + \text{воздух (st)}$	1.76	4.82
$\text{CH}_4 + \text{воздух (st)}$	1.89	5.07
$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{воздух (st)}$	1.88	5.38

кул и атомов. Вначале за счет внешнего инициатора возбуждаются поступательные и вращательные степени свободы, происходит распад молекул, формируется сильная взрывная волна, возникают мощные электромагнитные возмущения и т. д., на которые тратится энергия внешнего инициатора (химическое энерговыделение смеси на этом этапе $Q < 0$). Затем начинается химическая реакция, сопровождаемая новой порцией электромагнитных возмущений, которые своим воздействием способны привести к возвращению возбужденных ранее электронов на более низкие уровни. Химическая реакция выступает в роли стартового ключа для высвечивания возбужденных электронов, а резкое нарастание интенсивности излучения является естественным следствием, подобно процессам лазерной накачки и последующего скачкообразного излучения. Такая картина спонтанного возникновения структуры требует иного математического описания, нежели используемое в настоящее время (постепенное усиление слабых возмущений).

Правильное моделирование расходящихся волн актуально при решении многих задач, связанных с нестационарным распространением взрывных волн в горючих смесях. Моделирование наиболее типичных для пожаро- и взрывобезопасности ситуаций представляется безусловно полезным не только для выяснения физической природы наблюдаемых явлений и построения адекватных математических моделей рассматриваемых явлений, но и для выработки практических рекомендаций. Типичная постановка эксперимента — квазистационарная волна горения или детонации, предвари-

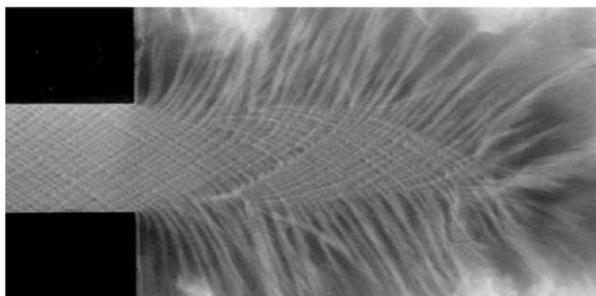


Рис. 7. Неклассический снимок самосвечения при дифракции ДВ в резко расширяющемся канале, иллюстрирующий возможность распространения волны в канале без стенок в области, «ограниченной продолжением стенок» исходного канала

тельно сформированная в магистральном канале постоянного сечения, переходит в измерительную секцию, сечение которой с определенного места начинает изменяться по одному из способов: расширение, сужение, сопловые профили, повороты. Изменение сечения порождает волны сжатия или разрежения, которые превращают установившийся процесс (в магистральном канале) в нестационарный процесс бифуркационного характера, итогом которого в зависимости от соотношения геометрических и кинетических параметров горючей смеси является либо затухание, либо реиницирование. На рис. 7 для смеси $C_2H_2 + 2.5O_2 + 10.5Ar$ представлен фотоснимок дифракции ДВ на прямом угле, наглядно иллюстрирующий роль излучения продуктов реакции: после выхода ДВ из основного канала волна продолжает распространяться так же, как по основному каналу, хотя уже никаких стенок нет. Причина в том, что излучение продуктов при распространении ДВ по каналу постоянного сечения «подготовило» исходную смесь вдоль области «продолжения» этого канала. Данный снимок свидетельствует в пользу высказанной выше гипотезы о роли спонтанного переизлучения в формировании структуры ДВ.

ДИФРАКЦИЯ ДВ С БИФУРКАЦИОННЫМИ СВОЙСТВАМИ

В экспериментальных исследованиях дифракции детонационной волны с бифуркационными свойствами [10, 17, 18] установлено, что такая характеристика, как дифракционный диаметр для оклостехиометрических смесей, определяется только большим масшта-

бом (критическое отношение диаметра трубы и размера большей ячейки близко к аналогичной величине для одномерных структур). Это несколько неожиданный результат, не согласующийся с современным представлением, согласно которому условия инициирования улучшаются при наличии дополнительных «горячих точек». В системах с бифуркационными свойствами таких «горячих точек» больше за счет большего количества поперечных волн в бифуркационных структурах ДВ и на первый взгляд влияние должно проявиться весьма заметно. Однако этого не наблюдается, что может быть объяснено относительно небольшим размером отдельной «горячей точки» в мелкомасштабной структуре. Иными словами, играет роль не только количество «горячих точек», но и их относительный размер.

Другое парадоксальное предположение: дополнительные точки не являются «горячими», а представляют собой ударно-волновые конфигурации нелинейных акустических возмущений, распространяющихся по переднему фронту детонационной волны. Действительно, при распространении УВ по инертной среде (плоская УВ устойчива к слабым возмущениям, в отличие от плоской ДВ) по ее фронту при слабом затухании могут длительно распространяться без усиления акустические возмущения, способные своими точками контакта с УВ «вычерчивать» ячеистые структуры (траектории тройных точек при их продольно-поперечном движении по фронту ударной волны). Такие «точки» с параметрами на уровне акустических, естественно, не могут заметно способствовать инициированию волны. Наблюдаемая в эксперименте картина не противоречит ударно-волновой (не детонационной) природе мелкочаеистых траекторий внутри крупноячеистой структуры, типичной для детонационных волн. Требуется дальнейшее исследование.

При удалении от стехиометрии начинает проявляться воздействие и мелкомасштабной структуры на дифракцию ДВ. Это обусловлено тем, что при удалении от стехиометрии, как правило, наблюдается укрупнение всех ячеистых структур (включая мелкомасштабную), в том числе размеров «горячих точек». При уходе от стехиометрии к пределам относительная роль «горячих точек» возрастает, а роль крупномасштабной структуры несколько уменьшается. Критическое соотношение диаметра тру-

бы и размера большей ячейки становится меньше по сравнению с аналогичной величиной для одномерных структур, возникает второй безразмерный параметр — отношение диаметра трубы к меньшему размеру ячейки. Дифракция ДВ с бифуркационными свойствами является многопараметрическим явлением.

ПРЕДЕЛЫ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ДВ С БИФУРКАЦИОННЫМИ СВОЙСТВАМИ

До недавнего времени считалось, что в химически активных смесях из нескольких топливных компонентов вырабатывается некоторый однозначный режим распространения, за который ответственны осредненные параметры системы (даже если система многопараметрична). Обнаружение бифуркационных структур детонации заставило проанализировать в первую очередь концентрационные пределы существования этих структур, подобно классическим концентрационным пределам (нижнему и верхнему) для однопаливных систем. На наличие пределов бифуркационных структур указывалось в [5, 6, 17] по результатам экспериментальных исследований горючих смесей ацетилен — кислород — закись азота. Последующие эксперименты продемонстрировали, что в области околопредельных режимов для бифуркационных структур мелкая ячейка структура возникает внутри крупноячейка скорее спонтанно, нежели путем монотонного изменения концентрации вблизи предела. Подобное спонтанное возникновение ячейка структура при ослаблении сильно пересжатой иницирующей волны наблюдается и при возбуждении детонации с классической моноразмерной структурой (см. вышеизложенное и рис. 4).

Для оценки пределов бифуркационных структур воспользуемся следующими соображениями. По результатам многочисленных расчетов волн горения и детонации однопаливных систем установлено, что вблизи концентрационных пределов в продуктах реакции фиксируются только конечный продукт и избыточный компонент. Например, на нижнем пределе смеси водород — кислород наблюдаются вода и неиспользованный кислород без промежуточных веществ (атомарного кислорода O и водорода H , радикала OH и т. д.), а на верхнем пределе — вода и неиспользованный водород (рис. 8). Это означает, что водород и кислород реагируют по стехиометрическому соотношению, а выделившаяся в результате реакции

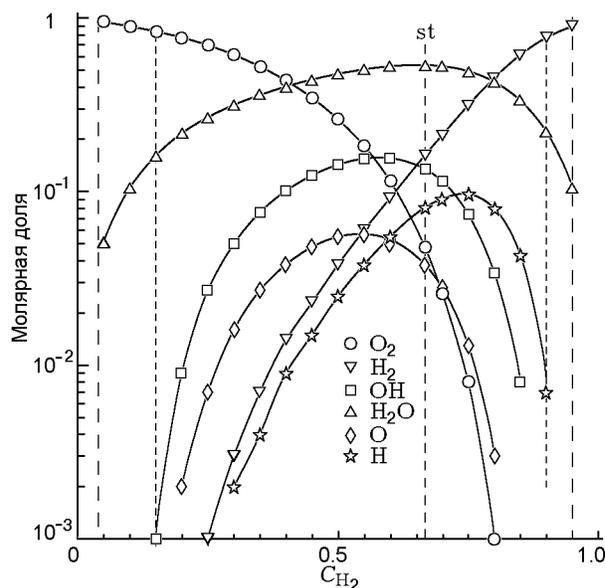


Рис. 8. Состав продуктов реакции водородокислородных смесей различного состава:

пара внешних штриховых линий соответствует пределам горения, пара внутренних — пределам детонации; на концентрационных пределах распространения в продуктах фиксируются лишь вода и избыточный компонент (кислород на нижнем пределе и водород на верхнем)

химическая энергия идет от горячего водяного пара на нагревание избыточного компонента до некоторой конечной температуры. Чтобы реакция не сорвалась, в качестве конечной разумно взять температуру самовоспламенения смеси.

На рис. 9 представлена идеализированная схема энергетических потоков для смеси $\alpha H_2 + O_2$. Концентрация водорода в смеси $C = \alpha/(1 + \alpha)$. Стехиометрии соответствует $\alpha_{st} = 2$ и $C_{st} = 2/3$. При $\alpha < 2$ область 1 — продукты реакции стехиометрической смеси $\alpha H_2 + \alpha/2 O_2$; область 2 — избыточный компонент (кислород) в исходном состоянии, $(1 - \alpha/2) O_2$; область 3 — конечное состояние системы после охлаждения области 1 и нагрева области 2. При $\alpha > 2$ область 1 — продукты реакции стехиометрической

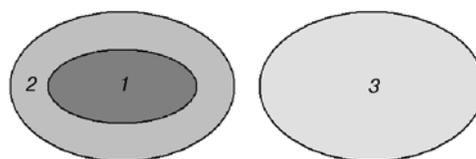


Рис. 9. Идеализированная схема энергетических потоков в системе $\alpha H_2 + O_2$

ской смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$; область 2 — избыточный компонент (водород) в исходном состоянии, $(\alpha - 2)\text{H}_2$; область 3 — конечное состояние системы после охлаждения области 1 и нагрева области 2.

Балансное уравнение между химическим энерговыделением стехиометрической смеси, охлаждением водяного пара и нагревом избыточного компонента до температуры самовоспламенения смеси позволяет оценить концентрационные пределы (по топливу и окислителю). Результаты расчетов по предлагаемому алгоритму коррелируют с известными справочными данными по концентрационным пределам (например, [19]). В свою очередь, следует отметить, что обнаружены и отклонения от справочных величин. Чтобы найти причину таких отклонений требуется дальнейший анализ, причем как с точки зрения термодинамических параметров смеси (существование решения там, где его не должно быть), так и с точки зрения надежности экспериментальных данных (особенно это касается анализа геометрического фактора — например, одинаковы ли экспериментальные пределы горения, полученные на горелках различного диаметра).

Для многотопливных систем с бифуркационными свойствами вместо химической энергии стехиометрической реакции основного топлива следует выбрать энергию, выделяющуюся при распаде дополнительного компонента. Минимальное количество этой энергии, способное «запустить» реакцию основного топлива, определяет нижний концентрационный предел. Подобный подход дал разумные оценки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполнения экспериментальных и численных исследований получила подтверждение гипотеза о природе бифуркационных структур газовой детонации, основанная на присутствии в многотопливной системе веществ с положительным энерговыделением при своем разложении. Это позволяет вести целенаправленное исследование данных структур, заранее прогнозируя вероятность их появления в рассматриваемой многотопливной системе.

Обширные экспериментальные исследования позволили обнаружить двухразмерные ячеистые структуры детонационных волн в новых смесях.

Установлено, что соотношение между большим и малым размерами ячеек меняет-

ся при изменении концентрации компонента, ответственного за бифуркационные свойства. Совокупность экспериментальных данных по различным смесям свидетельствует о наличии концентрационных пределов существования для бифуркационных структур, подобно классическим концентрационным пределам детонации (нижнему и верхнему) для традиционных одномерных структур. При этом концентрационные пределы для бифуркационных структур оказались уже пределами для классической детонации.

При экспериментальных исследованиях дифракции детонационной волны с бифуркационными свойствами установлено, что такая характеристика, как дифракционный диаметр, для оклостехиометрических смесей определяется только большим масштабом (критическое отношение диаметра трубы к размеру большей ячейки близко к аналогичной величине для одномерных структур). При удалении от стехиометрии проявляется также воздействие и мелкомасштабной структуры на дифракцию ДВ. Критическое отношение диаметра трубы и размера большей ячейки становится меньше аналогичной величины для одномерных структур, возникает второй безразмерный параметр — отношение диаметра трубы к меньшему размеру ячейки.

Базовая при моделировании идея о возникновении структуры за счет постепенного усиления слабых возмущений не подтверждается экспериментально.

Выполненные на сегодняшний день исследования, проясняя многое, ставят множество вопросов о природе и характеристиках бифуркационных структур. Часть результатов выходит за рамки классических представлений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Vasil'ev A. A. Cell size as the main geometric parameter of multifront detonation wave // *J. of Propulsion and Power*. — 2006. — V. 22, N 6. — P. 1245–1260.
2. Vasil'ev A. A. Dynamic parameters of detonation // *Shock Wave Science and Technology Reference Library*. V. 6: Detonation Dynamics / F. Zhang (Ed.). — Springer, 2012. — P. 213–279.
3. Presles H. N., Desbordes D., Guirard M., Gueraud C. Gaseous nitromethane and nitromethane-oxygen mixture, a new detonation structure // *Shock Waves*. — 1996. — N 6. — P. 111–114.

4. **Luche J., Presles H.-N., Desbordes D.** Influence of Ar dilution on detonation regime in H_2 — NO_2/N_2O_4 mixtures // CD: Proc. of the 20th ICDERS, Monreal, Canada, 2005.
5. **Васильев А. А., Молетотов А. А., Троцюк А. В.** О двухразмерной ячеистой структуре газовой детонации // XIII Симпозиум по горению и взрыву. — Черногловка, 2005. — CD-ROM.
6. **Vasil'ev A. A., Trotsyuk A. V.** Multi-scaled cellular structure of gaseous detonation // 5 ISFS Proc. of the 5th Intern. Seminar on Flame Structure. — Novosibirsk, Russia, July 11–14, 2005 / O. Korobeinichev (Ed.). — Novosibirsk: Parallel Ltd., 2005. — OPr-08. — CD-ROM.
7. **Vasil'ev A. A., Vasiliev V. A.** Ammonia: detonation hazards, multi-structure // 4th European Combustion Meeting, Vienna University of Technology, 14–17 April 2009, Vienna/Austria: Book of Abstr. — P. 213. — (См. также CD-ROM).
8. **Васильев А. А., Васильев В. А., Троцюк А. В.** Бифуркационные структуры газовой детонации // Физика горения и взрыва. — 2010. — Т. 46, № 2. — С. 88–100.
9. **Guilly V., Khasainov B., Presles H.-N., Desbordes D., Vidal P.** Numerical study of detonation cells under non-monotonous heat release // Proc. of the 20th ICDERS, Monreal, Canada, 2005. — CD-ROM.
10. **Desbordes D., Presles H.-N.** Multi-scaled cellular detonation // Shock Wave Science and Technology Reference Library. V. 6: Detonation Dynamics / F. Zhang (Ed.). — Springer, 2012. — P. 281–338.
11. **Vasil'ev A. A., Trotsyuk A. V.** Self-organization of multifront structure in expanding detonation wave // 18th Intern. Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, July 29–August 03, 2001, Seattle, USA, Univ. Washington. — CD-ROM. — N 001.
12. **Fujiwara T., Takasu A., Miyasaka T.** Detonation propagation in variable cross section channels // Ibid. — N 108.
13. **Васильев А. А., Троцюк А. В.** Экспериментальное исследование и численное моделирование расширяющейся многофронтной детонационной волны // Физика горения и взрыва. — 2003. — Т. 39, № 1. — С. 92–103.
14. **Ichikawa T., Matsui A.** Study of cell width and shock pressure in directly initiated spherical detonation // Proc. of the 22nd ICDERS, Minsk, Belarus, 2009. — CD-ROM.
15. **Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В.** Возбуждение и срыв детонации в газах // Инж.-физ. журн. — 2010. — Т. 83, № 6. — С. 1174–1201.
16. **Манжалей В. И., Субботин В. А.** Экспериментальное исследование устойчивости пережатой детонации в газе // Физика горения и взрыва. — 1976. — Т. 12, № 6. — С. 935–942.
17. **Vasil'ev A. A.** The quasi-steady regimes of wave propagation in active mixtures // Shock Wave. — 2008. — V. 18, N 4. — P. 245–253.
18. **Desbordes D., Joubert F., Virof F., Khasainov B., Presles H.-N.** Critical tube diameter in a two reaction-steps detonation: H_2/NO_2 mixture // Proc. of the 21th ICDERS, Poitiers, France, 2007. — CD-ROM.
19. **Баратов А. Н., Корольченко А. Я., Кравчук Г. Н. и др.** Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения: справочник: в 2 т. — М.: Химия, 1990.

Поступила в редакцию 26/1 2013 г.