

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ЯЧЕИСТОЙ ГЕТЕРОГЕННОЙ ДЕТОНАЦИИ ЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ В КИСЛОРОДЕ

А. В. Федоров, Т. А. Хмель

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск, khmel@itam.nsc.ru

Исследуется формирование ячеистой детонации в стехиометрической взвеси частиц алюминия в кислороде на основе численного моделирования ударно-волнового инициирования детонации в плоском, достаточно широком канале. Путем варьирования ширины канала определены характерные размеры ячеек регулярных равномерных структур для фракций частиц в диапазоне $1 \div 10$ мкм. Расчетные размеры ячеек согласуются с оценками, полученными методом акустического анализа. Установлена связь между размером ячейки и протяженностью характерных зон структуры детонационной волны (задержки воспламенения, горения, скоростной и тепловой релаксации).

Ключевые слова: газозвеси, ячеистая детонация, численное моделирование.

ВВЕДЕНИЕ

Как известно, широко используемая модель детонации Зельдовича — Неймана — Дёринга, являясь прекрасным идеальным приближением, не описывает всех особенностей распространения реальных детонационных волн. Ввиду неустойчивости плоского фронта относительно пространственных возмущений, устанавливается режим распространения в форме многофронтной или ячеистой детонации. Детонационный фронт при этом состоит из участков пересжатой и затухающей детонационных волн, соединяющихся в тройных точках, из которых выходят также поперечные волны. Система поперечных волн, движущихся в противоположных направлениях, является регулярной, а траектории тройных точек при распространении фронта формируют картину в виде ромбовидных ячеек. Механизмы, обуславливающие ячеистый характер детонации, играют важную роль в процессах перехода дефлаграции в детонацию в ограниченных объемах и при выходе детонации в открытое пространство. Проблеме ячеистой детонации в смесях газов посвящено большое число работ (см. обзоры [1–4]).

Одним из важных вопросов ячеистой детонации является установление связи между размером ячейки и характеристиками детонации. Основными геометрическими масштабами, характеризующими химические процессы в дето-

национной волне, являются протяженности зон индукции (задержки воспламенения) и горения. Анализ первых результатов, позволивших получить некоторые представления о взаимосвязи поперечного (a) либо продольного (b) размера ячейки с физико-химическими свойствами смеси газов, приведен в обзоре [2]. Линейная зависимость размера ячейки от протяженности зоны индукции: $a = k\lambda$, $\lambda = (D_0 - u)\tau$ — впервые установлена в [5] в приближении, когда зона реакции состоит из зоны индукции и фронта мгновенного тепловыделения, что соответствует особенностям детонационного горения газовых смесей. (Здесь D_0 — скорость фронта, u — скорость газа за фронтом, τ — время индукции, k — коэффициент пропорциональности.) Последующие исследования подтвердили вывод о том, что механизмы, приводящие к неустойчивости, имеют место в области тепловыделения [1]. Оценка размера ячейки из условий срыва воспламенения за расходящимся цилиндрическим фронтом приводит к связи поперечного размера ячейки с протяженностью зоны индукции в виде $b \approx \frac{E_a}{RT} D_0 \xi \tau_0$, где E_a — энергия активации, R — универсальная газовая постоянная, T — температура, τ_0 — время индукции, ξ — константа, значение которой ($0.5 < \xi < 2$) зависит от выбора критерия срыва воспламенения [6]. Подобная зависимость размера ячейки от длины зоны индукции получена в [7] в рамках принятой авторами схематической модели детонационной ячейки, где столкновение поперечных волн рассматривается как микро-

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (номер проекта 03-01-00453).

взрыв с мгновенной зоной реакции. Линейный закон изменения размера ячейки в зависимости от изменения зоны индукции выведен также из обработки данных экспериментальных наблюдений ячеистых структур пересжатой детонации [8]:

$$\frac{\lambda}{\lambda_{CJ}} = \frac{L_{ind}}{L_{CJ}} = \frac{D}{D_{CJ}} \exp \left\{ \frac{E_a}{RT_{ZND}} \left[\left(\frac{D_{CJ}}{D} \right)^2 - 1 \right] \right\}.$$

Здесь λ — характерный поперечный размер ячейки, L_{ind} — длина зоны индукции, D — скорость фронта, индекс CJ указывает на волну Чепмена — Жуге, T_{ZND} — температура на фронте в модели Зельдовича — Неймана — Дёринга. Первая часть соотношения, очевидно, не является универсальной, так как с увеличением степени пересжатия изменяются как скорость детонации, так и параметры в зоне химика и в равновесном состоянии.

Таким образом, в рамках вышеприведенных подходов размер ячейки связывают с шириной зоны индукции, которая является определяющей в структуре волны газовой детонации. Как указано в [2], при учете конечности размера зоны тепловыделения зависимость имеет более сложный характер.

В работе [9] для оценки размера детонационной ячейки привлекается не только зона индукции, но и зона горения. Поперечный размер ячейки (расстояние между следующими в одном направлении поперечными волнами) определяется из анализа распространения акустических возмущений в поле течения за фронтом стационарной детонации. Размеры ячейки, вычисленные для базового поля течения волны Чепмена — Жуге, значительно превышают наблюдаемые в экспериментах. Однако рассмотрение пересжатых волн (с небольшой степенью пересжатия) позволило существенно приблизиться к данным экспериментов и получить качественное согласование при изменении начального давления и состава газовых смесей.

Исследования [10, 11] подтверждают влияние зоны тепловыделения на размер детонационной ячейки. В [10] анализировались результаты измерений размеров ячеек в смесях водород — воздух с добавками углекислого газа и размеров зон, вычисленных по моделям с учетом детальной химической кинетики и характеризующих процесс химической реакции (индукции и горения по различным критериям). Из результатов при изменении состава смесей установлено, что размер ячейки связан с зона-

ми индукции и горения более сложной зависимостью, чем линейная. В [11] установлена связь между протяженностями характерных зон реакции, определенных с использованием детальной химической кинетики в одномерной модели Зельдовича — Неймана — Дёринга, и размерами ячеек, наблюдаемыми экспериментально и полученными численно в рамках модели с приведенной одношаговой химической кинетикой. Эта связь отражена в двух основных параметрах. Один из них определяет меру чувствительности зоны реакции к изменению начальных условий (амплитуды ударной волны), второй связан с отношением тепловыделения химической реакции к начальной тепловой энергии.

Связь между размером ячейки и протяженностью зон индукции и горения экспериментально подтверждена и в случае детонации гетерогенных смесей, обладающей более сложной структурой. Наблюдения ячеистой гибридной детонации в смеси водород — воздух с добавками порошка алюминия в [12, 13] показали, что присутствие частиц алюминия оказывает противоположное влияние на характеристики газовой детонации в зависимости от размера частиц. Так, добавка мелких сферических и хлопьевидных частиц приводит к увеличению скорости детонации и уменьшению характерного размера ячейки. Добавка крупных частиц способствует уменьшению скорости детонации и увеличению размера ячейки в сравнении с газовой детонацией. По-видимому, это обусловлено тем, что с ростом концентрации частиц характеристики детонации все более определяются процессами воспламенения и горения алюминия. Поэтому присутствие быстро воспламеняющихся и быстро сгорающих (мелких или хлопьевидных) или долго воспламеняющихся и медленно горящих (крупных) частиц приводит к противоположным эффектам.

Степень влияния масштабов зоны индукции и зоны тепловыделения (горения) на характеристики ячеистой детонации более надежно может быть определена для сред, в которых эти масштабы сравнимы по порядку величины. Такими смесями, в частности, являются воздушные или кислородные взвеси реагирующих частиц, длительность горения которых, как правило, больше периода задержки воспламенения. Детонационные течения в дисперсных средах характеризуются также процессами межфазного взаимодействия, в силу чего им присущи дополнительные масштабы, опреде-

ляемые протяженностью зон скоростной и тепловой релаксации фаз. Вопрос, в какой мере эти масштабы могут влиять на формирующиеся структуры ячейистой детонации, представляет значительный интерес.

Процесс ячейистой гетерогенной детонации газовзвесей алюминия малоизучен. В экспериментах [14] по инициированию детонации в смеси частиц алюминия и кислорода в неограниченном облаке зафиксировано несколько ячейисто-подобных структур размером $5 \div 10$ см. Такие структуры наблюдались на внешней границе облака, поэтому возникают сомнения, будут ли они существовать на следующей стадии распространения. В работе [15] исследовались процессы перехода дефлаграции в детонацию во взвесах крахмала, антрахинона и алюминия в воздухе. Данные по распределению давления в волне детонации взвеси хлопьевидных частиц алюминия указывают на наличие поперечных волн, свойственных ячейистой детонации, где характерный размер ячейки составляет ≈ 0.4 м.

Одним из успешно применяемых методов исследования детонационных процессов, в том числе и ячейистой детонации, является численное моделирование, которое позволяет выявить детальную картину течения и определить качественные и количественные зависимости динамических и геометрических характеристик от исходных параметров. В [16] представлены результаты численного моделирования ячейистых структур гибридной детонации водородокислородной смеси с добавками частиц алюминия. Анализ результатов расчета размеров ячейки при варьировании содержания частиц в смеси показал, что при добавлении мелких частиц зависимость размера ячейки от скорости детонации хорошо согласуется с формулой, полученной в [12] для пересжатой детонации. Для крупных частиц алюминия ($d = 13$ мкм) эта зависимость соблюдается лишь при малом содержании частиц.

Численное моделирование ячейистой гетерогенной детонации бедной газовзвеси мелких частиц алюминия ($d = 1$ и 2.5 мкм) проводилось в [17]. В качестве несущего газа рассматривался кислород. Расчетная скорость детонации при принятом значении начальной концентрации частиц, отвечающей стехиометрии в воздухе, согласуется с соответствующими результатами [18]. Расчеты на адаптивных сетках с высоким разрешением позволили вы-

явить детальную картину двумерной структуры течения ячейистой детонации. Расчетные размеры ячеек составили 6 см для частиц диаметром 2.5 мкм, переходные структуры с размером ячейки от 1.1 до 1.4 см получены для частиц диаметром 1 мкм.

Практика численного моделирования двумерных течений газовой детонации показывает зависимость ячейистой структуры от размеров области [19] и существование переходных структур с изменением характера регулярности и размера ячейки [20]. Для того чтобы определить собственный размер ячейистой структуры, здесь необходимо исключить влияние граничных условий. При расчетах в области с поперечным размером порядка одной ячейки существует дополнительный масштаб длины, что привязывает ширину ячейки к ширине области [19]. Наиболее достоверный размер ячейки определяется в областях, содержащих большое количество ячеек, как отношение ширины области к числу ячеек по поперечному сечению.

В настоящей работе численно находится характерный размер структуры ячейистой детонации в газовзвеси частиц алюминия в кислороде для различных фракций частиц. С учетом результатов [19] расчеты выполнялись для каналов, содержащих несколько ячеек, размеры ячейки определялись из данных для сформированных равномерных регулярных структур. Протяженности характерных зон (скоростной и тепловой релаксации, задержки воспламенения, горения) в гетерогенной смеси зависят от размера частиц, тогда как скорость фронта и амплитудные характеристики детонации можно считать неизменными. Цель работы — установить зависимость между размером детонационной ячейки и масштабами, характеризующими протекание динамических и химических процессов в структуре волны гетерогенной детонации. Проведено сравнение численных результатов с оценками размера ячейки, полученными в рамках акустического анализа [9].

Математическая модель детонации частиц алюминия в кислороде, верифицированная по экспериментальным данным [21], развита в [22–24] и применялась в [25–27]. Модель основана на представлениях двухскоростного двухтемпературного континуума механики гетерогенных сред. Горение алюминия описывается в виде приведенной реакции, инициируемой при достижении частицей некоторой критической

температуры (температуры воспламенения) и учитывающей неполное сгорание частиц, обусловленное нарастанием оксидной пленки, препятствующей горению. При этом значения исходных параметров (температуры воспламенения, энергии активации, тепловыделения и скорости химической реакции) определялись с учетом их соответствия известным экспериментальным данным по скорости детонации и протяженности зон задержки воспламенения и горения. Зависимость скорости стационарной детонации от концентрации частиц принималась в соответствии с данными [21]. Характерное время горения частицы алюминия в кислороде согласуется с данными [28]. Температура воспламенения, определяющая время индукции, задавалась близкой либо равной значению, принятому в [18]. Теоретический анализ стационарных структур детонации выполнен в [24], результаты расчетов параметров в плоскости Чепмена — Жуге соответствуют экспериментальным данным [21] по давлению и концентрации несгоревших частиц. Численное исследование одномерных и двумерных задач ударно-волнового инициирования в рамках модели проводилось в [25–27], результаты [25, 26] согласуются с экспериментальными и расчетными данными [18] по энергии инициирования. В силу вышесказанного представляется целесообразным использовать данную модель для исследования ячеистой детонации в газозвеси частиц алюминия в кислороде и для получения качественных и количественных характеристик ячеистых структур.

ФИЗИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается облако монодисперсной однородной взвеси сферических частиц алюминия в кислороде с концентрацией, близкой к стехиометрической (1.34 г/м³), которое заполняет полупространство бесконечно протяженного плоского канала на всю ширину поперечного сечения. Процесс формирования ячеистой структуры моделируется как результат развития возмущений, возникающих при ударно-волновом инициировании детонации в газозвеси. В качестве инициирующего воздействия рассматривается плоская ударная волна (УВ), распространяющаяся вдоль канала по чистому газу (кислороду) и сопровождаемая волной разрежения. Физическая постановка задачи, таким образом, является двумерным

обобщением работы [26] или частным случаем модели [27], когда реагирующая смесь заполняет все поперечное сечение канала. При достаточных величинах амплитуды и запасенной энергии [26, 27] в облаке формируется пересажатая детонационная волна, которая ослабляется под действием волны разрежения и выходит на режим нормальной детонации. Роль инициатора малых возмущений выполняет начальное неоднородное в поперечном направлении возмущение плотности частиц на участке малой длины, примыкающем к переднему краю облака.

Уравнения, описывающие течение двухфазной смеси в двухскоростном двухтемпературном приближении механики гетерогенных сред, выражают законы сохранения массы, импульса и энергии каждой из фаз:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i u_i}{\partial x} + \frac{\partial \rho_i v_i}{\partial y} = (-1)^{i-1} J,$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i u_i}{\partial t} + \frac{\partial [\rho_i u_i^2 + (2-i)p]}{\partial x} + \frac{\partial \rho_i u_i v_i}{\partial y} = \\ = (-1)^{i-1} (-f_x + J u_2), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i v_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_i u_i v_i)}{\partial x} + \frac{\partial [\rho_i v_i^2 + (2-i)p]}{\partial y} = \\ = (-1)^{i-1} (-f_y + J v_2), \quad (1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i E_i}{\partial t} + \frac{\partial [\rho_i u_i (E_i + (2-i)p/\rho_1)]}{\partial x} + \\ + \frac{\partial [\rho_i v_i (E_i + (2-i)p/\rho_1)]}{\partial y} = \\ = (-1)^{i-1} (-q - f_x u_2 - f_y v_2 + J E_2). \end{aligned}$$

Здесь p — давление; $\rho_i = m_i \rho_{ii}$, u_i , v_i , E_i , $c_{v,i}$ — средняя плотность, продольная и поперечная компоненты скорости, полная энергия на единицу массы и теплоемкость i -й фазы ($i = 1, 2$); m_i — объемная концентрация; ρ_{ii} — истинные плотности фаз; индекс 1 относится к газу, 2 — к частицам. Система замыкается уравнениями состояния (в приближении малой объемной концентрации частиц)

$$p = \rho_1 R T_1, \quad E_i = \frac{u_i^2 + v_i^2}{2} + c_{v,i} T_1 + (i-1)Q \quad (2)$$

и приведенным уравнением химической реакции

$$J = \frac{\rho}{\tau_{\xi}} \max(0, (\xi - \xi_k)) \exp\left(-\frac{E_a}{RT_2}\right), \quad T_2 \geq T_{ign};$$

$$J = 0, \quad T_2 < T_{ign},$$

где T_1, T_2 — температуры газа и частиц, Q — тепловыделение химической реакции, $c_{v,1}, c_{v,2}$ — теплоемкости газа и частиц, $\xi = \rho_2/\rho$ — относительная массовая концентрация частиц, $\rho = \rho_1 + \rho_2$, E_a — энергия активации, ξ_k — концентрация твердой фазы в точке Чепмена — Жуге (несгоревшие частицы вместе с конденсированным оксидом алюминия), T_{ign} — температура воспламенения, τ_{ξ} — характерное время горения. Математическая модель (1)–(3) является полуэмпирической и включает константы, которые определяются из условия соответствия экспериментальным данным. Величина Q , характеризующая интегральное тепловыделение химической реакции, задается таким образом, чтобы обеспечить соответствие данным [21] по зависимости скорости детонации от концентрации частиц. Процессы межфазного взаимодействия определяются формулами:

$$\vec{f} = \frac{3m_2\rho_{11}}{4d} c_D |\vec{u}_1 - \vec{u}_2| (\vec{u}_1 - \vec{u}_2),$$

$$q = \frac{6m_2\lambda_1}{d^2} \text{Nu}(T_1 - T_2);$$

$$c_D(\text{Re}, M_{12}) = \left(1 + \exp\left(-\frac{0.43}{M_{12}^{4.67}}\right)\right) \times \left(0.38 + \frac{24}{\text{Re}} + \frac{4}{\sqrt{\text{Re}}}\right);$$

$$\text{Nu} = 2 + 0.6\text{Re}^{1/2}\text{Pr}^{1/3},$$

$$\text{Re} = \frac{\rho_{11}d|\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2|}{\mu},$$

$$M_{12} = \frac{|\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2|\sqrt{\rho_{11}}}{\sqrt{\gamma_1 p}}.$$

Здесь d — диаметр частиц, c_D — коэффициент сопротивления частиц, λ_1 — теплопроводность газа, $\text{Re}, \text{Nu}, \text{Pr}, M$ — числа Рейнольдса, Нуссельта, Прандтля, Маха соответственно, μ — вязкость газа. Формула (5) для коэффициента сопротивления принята в соответствии с [29],

как обеспечивающая согласование с экспериментальными данными по траекториям движения частиц за проходящими УВ.

Начально-краевая задача для системы (1)–(6) формулируется следующим образом:

$$t = 0: \quad \varphi = \begin{cases} \varphi_l, & 0 \leq x < X_l, \\ \varphi_{rw}(x), & X_l \leq x < X_r, \\ \varphi_{sw}, & X_r \leq x < X_{sw}, \\ \varphi_{g0}, & X_{sw} \leq x < X_{cl}, \\ \varphi_{fluc}(y), & X_{cl} \leq x < X_{fl}, \\ \varphi_0, & X_{fl} \leq x < +\infty, \end{cases} \quad (7)$$

где $\varphi = \{\rho_1, \rho_1 u_1, \rho_1 v_1, \rho_1 E_1, \rho_2, \rho_2 u_2, \rho_2 v_2, \rho_2 E_2\}$ — вектор решения, φ_{sw} — состояние на фронте УВ в газе, $\varphi_{rw}(x)$ — профиль центрированной волны разрежения, соединяющей состояния φ_l ($p = p_0$) и φ_{sw} , X_l, X_r — левая и правая границы волны разрежения, X_{sw} — начальное местоположение фронта падающей УВ, φ_{g0} — состояние перед фронтом УВ в газе, φ_0 — начальное состояние смеси в облаке, X_{cl} определяет переднюю границу облака, X_{fl} — координата границы возмущенного слоя, $X_{fl} - X_{cl}$ — ширина возмущенного слоя, $\varphi_{fluc}(y)$, $0 \leq y \leq Y$, определяет возмущенное состояние смеси в этом слое, Y — ширина канала (расчетной области).

Граничные условия на стенках канала заданы в соответствии с условиями непротекания и теплоизоляции: $\partial\varphi/\partial y = 0$. На левой границе области ($x = 0$) ставились «мягкие» граничные условия: $\partial\varphi/\partial x = 0$. На правой границе, всегда находящейся на некотором расстоянии впереди ударного (детонационного) фронта, $\varphi = \varphi_0$.

Начальные значения параметров смеси взяты такими же, как и в [26, 27]: $p_0 = 1$ атм, $T_0 = 300$ К. Начальное значение массовой концентрации частиц $\xi_0 = 0.55$, что соответствует значению $\rho_{20} = 1.34$ кг/м³. Размер частиц варьировался от 1 до 12 мкм. Характерное время горения τ_{ξ} задавалось в виде [28] $\tau_{\xi} = \tau_0(d/d_0)^2$, принято $\tau_0 = 0.0024$ мс, $d_0 = 10$ мкм. Расчетная длительность горения частицы размером 10 мкм в плоской стационарной детонационной волне составляла ≈ 0.07 мс при $E_a = 10^6$ Дж/(кг·К). Это согласуется (учитывая квадратичную зависимость от диаметра) с приведенными в [28] данными по горению частиц алюминия в чистом кислороде.

Значения параметров начального профиля инициирующей УВ выбирались так, чтобы

обеспечить условия инициирования детонации в облаке смеси [26, 27]. Возмущение, инициирующее развитие поперечных волн, задавалось в виде

$$\rho_2 fluc(x, y) = \rho_{20}(1 + \beta \cos(n\pi y/Y)). \quad (8)$$

(В расчетах принималось $\beta = 0.1$, $X_{fl} - X_{cl} = 0.01$ м, $n = 1$.)

Расчеты проводились на равномерной конечно-разностной сетке. Расчетная область расширялась в направлении x по мере распространения по смеси лидирующего фронта, включая небольшой участок невозмущенного течения. Для расчета газовой фазы применялась схема класса TVD [30]. Для дискретной фазы часть расчетов проведена по схеме Мак-Кормака (схема 1), часть — по схеме Джентри — Мартина — Дали (схема 2) (одномерные реализации указанных схем имеются в [31]). Результаты тестирования метода на задачах одномерной и двумерной детонации приведены в [32]. Схема 2 показала более высокую эффективность, особенно при расчете двумерных детонационных течений, как по обеспечиваемой точности на одной и той же конечно-разностной сетке, так и по времени счета. Параметры конечно-разностной сетки выбирались в зависимости от размера частиц, определяющего протяженность зон горения и релаксации. Число узлов сетки на ширину структуры детонационной волны составляло $50 \div 200$. В отдельных вариантах проводилось сравнение результатов, полученных на вложенных сетках и при варьировании параметров β и n в формуле (8).

ФОРМИРОВАНИЕ ЯЧЕИСТОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ ИНИЦИИРОВАНИИ ДЕТОНАЦИИ

При численном моделировании ячеистой детонации в качестве начальных условий, как правило, задается течение за плоской стационарной детонационной волной, на которое накладываются возмущения, инициирующие поперечные волны. Процессы прохождения, отражения от границ области и взаимодействия этих поперечных волн приводят к формированию ячеистой структуры при дальнейшем распространении фронта. В настоящей работе развитие ячеистой детонации происходит в процессе формирования и распространения детонационной волны в облаке взвеси в результате ударно-волнового инициирования. Задаваемая неоднородность способствует появлению

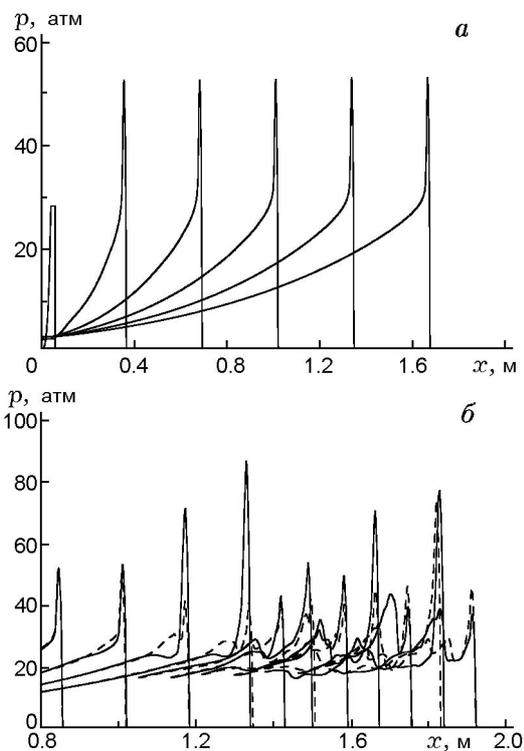


Рис. 1. Формирование детонации в одномерной (а) и двумерной (б) задачах:

сплошные линии — $y = 0$, штриховые — $y = 0.003$ м

слабых возмущений в течении, которые первоначально носят акустический характер, а затем по мере установления и распространения детонационной волны преобразуются в поперечные волны конечной амплитуды. Формирование ячеистой структуры проходит на фоне развития детонационного течения, что определяет естественный характер получаемой в расчетах ячейки. Численные эксперименты, проведенные при различных значениях амплитуды и длины волны возмущения, показывают, что геометрические параметры сформированной регулярной структуры не зависят от начальных параметров инициирования (амплитуды и профиля инициирующей ослабляемой УВ, амплитуды и моды возмущения, положения края облака).

Сценарии формирования плоских детонационных волн при взаимодействии УВ с облаком частиц газозвеси алюминия в кислороде в рамках настоящей модели численно исследовались в [26]. Типичная картина установления детонации в одномерной задаче для смеси частиц

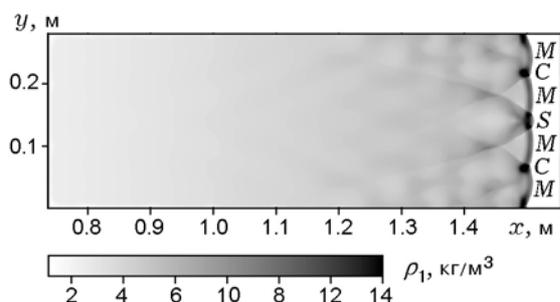


Рис. 2. Мгновенная картина течения в двумерной задаче (плотность газа)

диаметром 5 мкм представлена на рис. 1, а в виде профилей давления с шагом 0.2 мс. Выбранные значения амплитуды и запасенной энергии инициирующей УВ, профиль которой в начальный момент времени имеет вид трапеции, обеспечивают небольшое пересжатие сформированной детонационной волны и быстрый выход на стационарный режим. Скорость стационарной детонации $D = 1.56$ км/с. На рис. 1, б показаны аналогичные профили давления на нижней стенке канала ($y = 0$, сплошные линии) и в сечении $y = 0.003$ м (штриховые линии) в двумерном расчете по схеме 1 при $Y = 0.28$ м, $\Delta t = 0.1$ мс до момента времени 0.8 мс и далее $\Delta t = 0.05$ мс. Здесь до момента 0.6 мс возмущения малы и картина почти не отличается от установления плоской волны детонации в одномерной постановке. Последующее распространение волны приобретает нестационарный характер. Двумерная картина течения, приведенная на рис. 2 в виде распределения плотности газа в момент $t = 0.9$ мс, показывает, что данное явление обусловлено развитием ячеистой детонации, хотя приведенная структура не является идеально равномерной. Точки C со-

ответствуют столкновениям поперечных волн, а участок S в центре рисунка представляет собой пересжатую детонационную волну, здесь столкновение тройных точек уже произошло и поперечные волны расходятся. Участки M отвечают ножкам Маха, где в представленный момент времени происходит переход от пересжатой детонации к затухающей. Таким образом, в данном варианте формируется структура в 4 ячейки, средний поперечный размер которых составляет 7 см.

ЗАВИСИМОСТЬ РЕЗУЛЬТАТОВ ФОРМИРОВАНИЯ ЯЧЕИСТЫХ СТРУКТУР ОТ ШИРИНЫ РАСЧЕТНОЙ ОБЛАСТИ И ПАРАМЕТРОВ СЕТКИ

Влияние ширины расчетной области, конечно-разностной схемы и параметров сетки на результат формирования ячеистой гетерогенной детонации отвечает известным особенностям ячеистой газовой детонации [19]. В каналах, ширина которых меньше некоторого критического размера, фронт детонационной волны остается плоским, как и в одномерной задаче. С увеличением ширины канала (при фиксированном размере частиц) появляется регулярная структура в половину ячейки. Последующее изменение ширины канала порождает бифуркацию структуры, в результате которой образуется одна ячейка на ширину канала. Структуры в половину ячейки или одну ячейку на ширину канала всегда регулярны, т. е. число ячеек на ширину канала в процессе распространения фронта ячеистой детонации не меняется. Дальнейшее увеличение ширины канала вызывает последующие бифуркации, при которых происходят усложнение структур и изменение их характера. В более широких каналах вблизи точек бифуркации (когда небольшое увеличение ширины канала приводит к скачкообразному изменению числа ячеек) структуры нерегулярны, характеризуются дроблением и слиянием ячеек. В промежутках между точками бифуркации структуры регулярны, но могут содержать ячейки разного размера; такие структуры будем называть неравномерными. Степень неравномерности можно определить как отношение размеров минимальной и максимальной ячеек: $\psi = \lambda_{\min}/\lambda_{\max}$, λ — поперечный размер ячейки. Пример неравномерной ячеистой структуры приведен на рис. 2 и в верхней части рис. 3 для частиц $d = 5$ мкм и ширины канала $Y = 0.28$ м, где $\psi \approx 2$. Расчеты

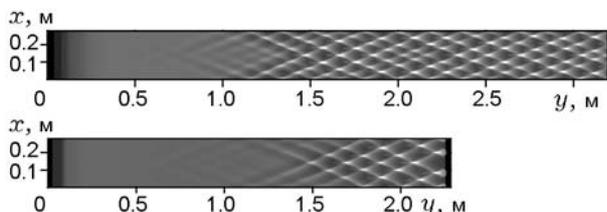


Рис. 3. Зависимость результатов формирования неравномерных структур от типа разностной схемы:

вверху — по схеме 1, внизу — по схеме 2

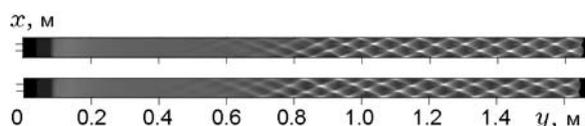


Рис. 4. Результаты расчетов на вложенных сетках кратности 2:

$d = 3$ мкм, $Y = 0.06$ м, $\Delta x = 0.0005$ (вверху) и 0.001 м (внизу)

показывают, что при некотором значении ширины канала между точками бифуркации формирующаяся структура равномерна ($\psi = 1$).

Сравнение результатов расчетов на различных сетках (включая вложенные) с использованием схемы 1 (TVD — Мак-Кормака) и схемы 2 (TVD — Джентри — Мартина — Дали) показало следующее. При ширине канала, близкой к значению бифуркации (структура нерегулярна или неравномерна), результаты расчетов существенно зависят от типа выбранной схемы и сеточного разрешения. На рис. 3 приведены результаты расчетов для частиц $d = 5$ мкм при $Y = 0.28$ м по схемам 1 и 2 на сетке с шагом $\Delta x = 0.001$. Получено различное число ячеек на ширину канала, а их неравномерность свидетельствует об отсутствии кратности между шириной канала и истинным размером ячейки. Аналогично влияет изменение шага сетки. Например, для частиц $d = 8$ мкм при $Y = 0.25$ м и расчете по схеме 2 с $\Delta x = 0.005$ м формируется структура в одну ячейку на ширину канала, а с шагом $\Delta x = 0.004$ м — в полторы ячейки. Воспроизводимые результаты в перечисленных вариантах получаются на существенно более мелких сетках, однако в силу нерегулярности или неравномерности структуры размер ячейки с достоверностью не определяется.

Если формирующаяся структура регулярна и равномерна (или близка к равномерной, $\psi \approx 1 \div 1.5$), расчеты на различных рассмотренных сетках (в том числе вложенных) с применением двух упомянутых конечно-разностных методов воспроизводят одно и то же число ячеек на ширину канала. При этом уменьшение шага расчетной сетки обеспечивает повышение точности представления детальной структуры течения, сохраняя характер структуры. Пример расчетов, выполненных по схеме 2 на вложенных сетках кратности 2 ($\Delta x = 0.0005$ и $\Delta x = 0.001$ м, $d = 3$ мкм, $Y = 0.06$ м), приведен на рис. 4.

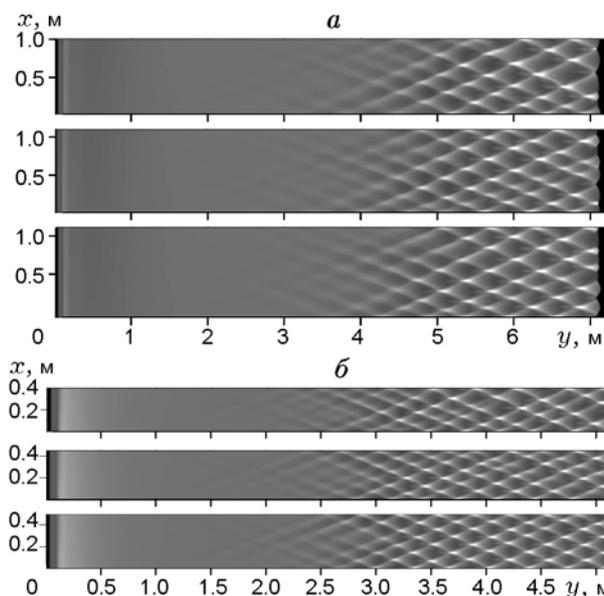


Рис. 5. Формирование неравномерных нерегулярных структур:

a — $d = 10$ мкм, $\Delta x = 0.004$ м, $Y = 1, 1.1$ и 1.2 м;
 b — $d = 7$ мкм, $\Delta x = 0.002$ м, $Y = 0.4, 0.45$ и 0.5 м

Таким образом, размер детонационной ячейки определяется при численном моделировании регулярных равномерных структур на сравнительно грубой сетке, содержащей $50 \div 100$ узлов на ширину ячейки.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАЗМЕРА ДЕТОНАЦИОННОЙ ЯЧЕЙКИ

Характерный размер детонационной ячейки определяется путем сравнения результатов расчетов формирования регулярных структур в каналах, содержащих более двух ячеек. Точки бифуркации структуры позволяют определить верхний и нижний пределы характерного размера детонационной ячейки. С увеличением ширины канала разница между пределами уменьшается, размер ячейки приближается к среднему значению. Как указывалось выше, при варьировании ширины канала вблизи этого значения меняется степень неравномерности регулярных структур. Предполагается, что достоверное значение размера ячейки отвечает равномерным структурам ($\psi \approx 1$). Для неравномерных регулярных структур среднее значение поперечного размера ячейки можно определить как отношение ширины канала к числу сформированных ячеек.

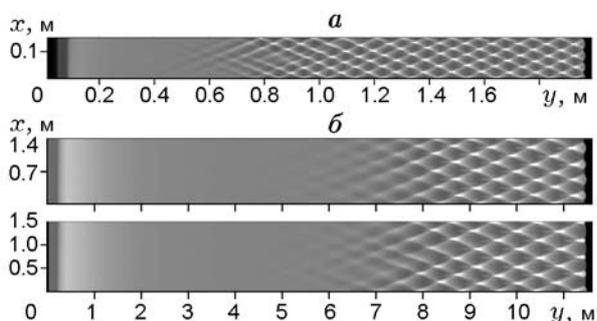


Рис. 6. Формирование равномерных регулярных структур:

a — $d = 3$ мкм, $\Delta x = 0.001$ м, $Y = 0.15$ м; *б* — $d = 12$ мкм, $\Delta x = 0.005$ м, $Y = 1.4$ и 1.5 м

На рис. 5 представлены результаты расчетов по схеме 2 с варьированием ширины канала для фракций частиц 10 мкм (рис. 5, *a*, $\Delta x = 0.004$ м) и 7 мкм (рис. 5, *б*, $\Delta x = 0.002$ м). При $Y = 1$ м (рис. 5, *a*, сверху) формируется структура в 3.5 ячейки, степень неравномерности которой $\psi \approx 2$; при $Y = 1.2$ м (внизу) — структура в 4.5 ячейки, близкая к равномерной ($\psi \approx 1.25$), и при $Y = 1.1$ м (средний рисунок) — структура в 4.5 ячейки со степенью неравномерности $\psi \approx 1.7$. Точка бифуркации находится между 1 и 1.1 м соответственно, размер ячейки для частиц $d = 10$ мкм лежит в интервале $24.4 \div 28.5$ см. Аналогичные данные для частиц $d = 7$ мкм приведены на рис. 5, *б*. Здесь при $Y = 0.4$ м формируется неравномерная ($\psi \approx 2$) структура в 2.5 ячейки, при $Y = 0.45$ м — нерегулярная структура и при $Y = 0.5$ м — почти равномерная ($\psi \approx 1.3$) структура в 3.5 ячейки. Здесь точка бифуркации близка к $Y = 0.45$ м, а размер ячейки лежит в интервале $12.8 \div 16$ см.

Примеры формирования равномерных и близких к равномерным регулярных структур приведены на рис. 6. Для частиц $d = 3$ мкм (рис. 6, *a*, $\Delta x = 0.001$ м) структура нерегулярна только на ранней стадии формирования, затем становится регулярной и равномерной и сохраняет далее свой характер; размер ячейки составляет ≈ 4.3 см. Для частиц $d = 12$ мкм при ширине канала $Y = 1.4$ м $\psi = 1.23$ (рис. 6, *б*, сверху), а при $Y = 1.5$ м $\psi = 1.1$ (внизу); размер ячейки лежит в интервале $35 \div 37.5$ см ($\Delta x = 0.005$ м). Симметрия по y на рис. 6, *б* при монотонном инициирующем возмущении (8) служит дополнительным свидетельством того, что формирование ячеистых структур яв-

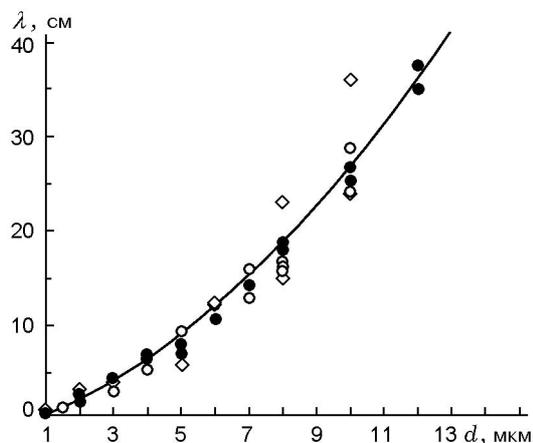


Рис. 7. Результаты расчетов поперечного размера детонационной ячейки взвеси алюминия в кислороде для частиц различных фракций:

темные кружки — равномерные или близкие к ним структуры, формирующиеся в широких каналах (не менее 2.5 ячеек); светлые кружки — неравномерные структуры, полученные в узких каналах ($1 \div 2$ ячейки); линия — зависимость (9)

ляется собственным свойством детонационного процесса и не определяется начальным возмущением.

Результаты расчетов поперечного размера детонационной ячейки λ приведены на рис. 7. Разброс данных уменьшается при переходе от структур, полученных в узких каналах ($1 \div 2$ ячейки, светлые ромбы на рис. 7) к неравномерным ячеистым структурам (светлые кружки) и далее к равномерным или близким к ним структурам, формирующимся в достаточно широких каналах (не менее 2.5 ячеек, темные кружки), что еще раз подтверждает достоверность результатов, определенных для равномерных структур в достаточно широких каналах.

Размеры ячеек регулярных равномерных структур (темные кружки на рис. 7) приближенно описываются степенной зависимостью от диаметра частиц:

$$\lambda = \lambda_0 (d/d_0)^\theta, \quad (9)$$

где $\lambda_0 = 27$ см при $d_0 = 10$ мкм, а показатель степени составляет $\theta = 1.6$ (сплошная линия на рис. 7).

Полученные результаты согласуются с экспериментальными данными работы [14], где при инициировании детонации во взвеси сферических частиц алюминия размером $d = 3.5$ мкм

в кислороде наблюдалось формирование детонационных ячеек размером $5 \div 10$ см. Как видно из рис. 7, для частиц $d = 3.5$ мкм поперечный размер ячейки составляет 5 см (соответственно продольный — около 10 см). Сравнение с расчетными данными [17] может носить лишь оценочный характер в силу различия значений начального содержания частиц и скорости фронта. Результаты для частиц размером 2.5 мкм получены в [17] в узком канале (2 ячейки на ширину канала), а изменение в процессе распространения фронта моды ячеистых структур для частиц $d = 1$ мкм указывает, что выбранное значение ширины области отвечает точке бифуркации. Формирующиеся при этом структуры характеризуются неравномерностью и нерегулярностью. В соответствии с данными [17] для частиц $d = 1$ мкм размер ячейки меняется от 1.1 до 1.4 см, для частиц $d = 2.5$ мкм составляет ≈ 6 см.

СВЯЗЬ РАЗМЕРА ЯЧЕЙКИ И ХАРАКТЕРНЫХ МАСШТАБОВ ДЕТОНАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ

Определение характерных масштабов зон релаксации и горения в нестационарном течении ячеистой детонации затруднительно в силу изменчивости структуры течения. Изменение максимального давления на фронте составляет $40 \div 120$ атм, что обуславливает значительные амплитуды изменения температуры и соответственно протяженности зон задержки воспламенения частиц, зон реакции, а также зон тепловой и скоростной релаксации. Поэтому используется подход, принятый в газовой детонации [9–11], где характерный размер детонационной ячейки связывается с параметрами и масштабами соответствующей стационарной одномерной волны детонации. Решение задачи о структуре стационарной детонационной волны получено из системы алгебраических и обыкновенных дифференциальных уравнений, которые являются следствием уравнений (1)–(5) в системе, связанной с фронтом. Качественные свойства стационарных решений при учете скоростной неравновесности описаны в [24].

Характерные пространственные масштабы течения устанавливались следующим образом. Протяженность зоны задержки воспламенения l_{ign} определялась как расстояние от фронта замороженной УВ до точки, в которой $T = T_{ign}$. За длину зоны реакции горения l_{ξ} принималось расстояние от фронта до точ-

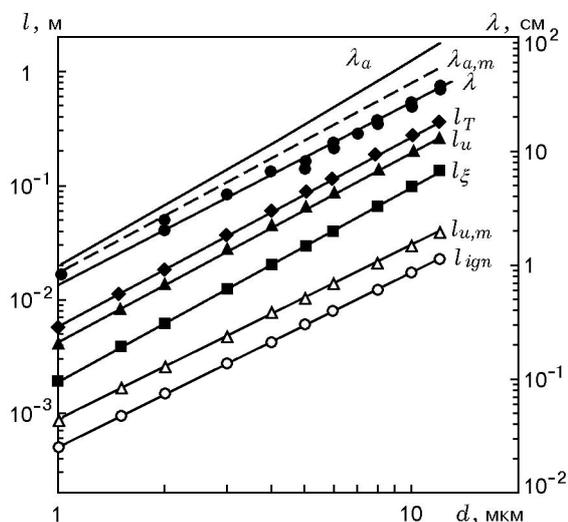


Рис. 8. Зависимости характерных масштабов течения от размера частиц:

λ — расчетный размер ячейки, λ_a — оценка размера ячейки из акустического анализа волны нормальной детонации, $\lambda_{a,m}$ — минимальный размер детонационной ячейки, определенный из акустического анализа перешагнутых и затухающих волн; длины зон: l_T — тепловой релаксации, $l_u, l_{u,m}$ — скоростной релаксации, l_{ξ} — горения, l_{ign} — задержки воспламенения

ки $|(\rho_2 - \rho_{2k})/\rho_{2k}| = \varepsilon$ (ρ_{2k} — плотность частиц в конечном равновесном состоянии, $\varepsilon = 5\%$). Процесс скоростной релаксации можно характеризовать двумя масштабами: зоны существенной скоростной неравновесности $l_{u,m}$ и полной скоростной релаксации l_u . Это связано с немонотонным поведением относительной скорости $u_1 - u_2$, которая максимальна на фронте замороженной УВ, затем убывает до некоторого отрицательного минимума, после которого возрастает и асимптотически приближается к нулю. (Профили скоростей в стационарной детонационной волне приведены, например, в [24].) Зададим протяженность $l_{u,m}$ как расстояние от фронта до первой точки $u_1 = u_2$. Зоны полной скоростной и тепловой релаксации l_u и l_T определяются по условным критериям $|(u_1 - u_2)/u_0| \geq 3.3\%$ и $|(T_1 - T_2)/T_0| \geq 3.3\%$.

На рис. 8 приведены результаты расчетов длин зон задержки воспламенения, химической, скоростной и тепловой релаксации в плоской волне стационарной детонации газозвеси частиц алюминия в кислороде. Здесь же в соответствующем масштабе приведены результаты расчетов размеров ячеек равномерных (близких к равномерным) структур. Как вид-

Показатели степени в зависимостях
 $l = Ad^\theta$ и $\lambda = Bd^\theta$

θ_{ign}	θ_ξ	$\theta_{u,m}$	θ_u	θ_T	θ_λ	θ_a	$\theta_{a,m}$
1.53	1.70	1.53	1.64	1.68	1.6	1.81	1.66

но, все данные укладываются на прямые линии, что указывает на степенные зависимости данных масштабов от размера частиц. Значения показателей степени для представленных масштабов приведены в таблице.

Как видно из рис. 8, протяженности зон задержки воспламенения l_{ign} и скоростной релаксации $l_{u,m}$ близки между собой и наклоны этих прямых совпадают, а из таблицы видно, что значение θ_{ign} и $\theta_{u,m}$ близки к 1.5. Анализ формул (4)–(6) показывает, что интенсивность тепловой релаксации пропорциональна $(2 + 0.6Re^{1/2}Pr^{1/3})/d^2$, поэтому в области непосредственно за замороженной УВ, где относительное число Рейнольдса максимально, определяющим является член с $Re^{1/2}$, что и предопределяет в итоге зависимость длины l_{ign} от размера частиц как близкую к $d^2/Re^{1/2}$ или $d^{3/2}$.

Зависимость длины зоны горения от размера частиц имеет показатель степени $\theta_\xi = 1.7$, отличный от 2, хотя для τ_ξ в формуле (3) принималась квадратичная зависимость от диаметра частиц. Этот факт указывает на различия в процессах горения взвеси частиц в детонационной волне и одиночной частицы в статических условиях. В силу закона Аррениуса на протяженность зоны горения влияет зона тепловой релаксации, для которой $\theta_T = 1.68$ (см. таблицу), вследствие чего $\theta_T < \theta_\xi < 2$. В свою очередь, процесс тепловой релаксации в соответствии с формулами (4)–(6) связан с процессом скоростной релаксации, что обуславливает близость значений θ_u и θ_T (см. таблицу).

Из данных, представленных на рис. 8 и в таблице, видно, что показатель степени θ_λ в зависимости размера ячейки от диаметра частиц не совпадает ни с θ_{ign} , ни с θ_ξ , а находится в промежутке между ними. Это указывает на то, что размер ячейки не связан однозначно с протяженностью какой-либо из двух характерных зон: задержки воспламенения и горения, определяющих ячейку газовой детонации, и обе зоны оказывают влияние на размер формирующейся детонационной ячейки. Для получения дополнительной информации проводились рас-

четы с варьированием температуры воспламенения и времени горения частицы. Увеличение T_{ign} до значения 1200 К в смеси частиц $d = 3$ мкм при фиксированном значении τ_ξ приводит к увеличению зоны задержки воспламенения примерно в два раза. При этом в канале шириной 0.15 м формирующаяся структура содержит также 3.5 ячейки, как и на рис. 6, а, но является неравномерной, т. е. с изменением размера ячейки данная ширина канала приближается к точке бифуркации. Увеличение порога воспламенения приводит к уменьшению длины зоны задержки воспламенения, соответственно этому уменьшается размер детонационной ячейки. Напротив, искусственное увеличение значения τ_ξ приводит к увеличению размера ячейки формирующейся структуры. Таким образом, здесь, как и в газовой детонации, на размер ячейки влияют и зона задержки воспламенения, и зона горения, которые, в свою очередь, зависят от процессов нагрева частиц и их торможения в потоке газа, т. е. от масштабов тепловой и скоростной релаксации.

ОЦЕНКА ХАРАКТЕРНОГО РАЗМЕРА ЯЧЕЙКИ В РАМКАХ АКУСТИЧЕСКОГО ПОДХОДА

В работе [9] предложен метод оценки характерного поперечного размера ячейки как расстояния между следующими одна за другой поперечными волнами (или «горячими точками» на фронте), основанный на анализе распространения акустических возмущений за фронтом волны детонации. Рассмотрение преобразования фронта расходящейся цилиндрической волны в поле плоского детонационного течения $u(x)$ (в сопутствующей фронту системе) привело к определению системы «вмороженных» лучей, т. е. кривых, наклон которых в каждой точке отвечает направлению распространения участка фронта конкретной волны. Каждый луч характеризуется константой σ , представляющей кажущуюся скорость распространения фронта волны в поперечном направлении. Анализ поведения «вмороженных» лучей показывает, что в поле детонационного течения имеются точки поворота, в которых происходит смена знака распространения участка фронта в направлении x , эти точки определяются условием $\sigma^2 = c^2 - u^2$, где c — скорость звука. Предполагая, что в «горячих точках» аккумулируются возмущения из зоны горения, первыми достигающие фронта, получено выра-

жение для поперечного размера детонационной ячейки

$$\lambda_a = 4 \int_{x_1}^{x_2} \frac{c}{\sqrt{\sigma_*^2 - (c^2 - u^2)}} dx. \quad (10)$$

Пределы интегрирования определяются как точки, одна из которых совпадает с фронтом замороженной УВ (точка x_1), вторая отвечает точке поворота луча $\sigma_*^2 = c^2 - u^2$ (точка x_2). Значение σ_* определено так, чтобы обеспечить (по всем σ) минимальное значение интеграла времени

$$t = 2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{c\sigma}{(c^2 - u^2)\sqrt{\sigma^2 - (c^2 - u^2)}} dx. \quad (11)$$

Структура волны газовой детонации рассматриваемой в [9] смеси (водород — кислород с добавками аргона) характеризуется «полочкой» в распределении функции $c^2 - u^2$ непосредственно за фронтом (в зоне индукции) и локальным максимумом в зоне горения, за которым следует убывание до нуля, достигаемого в плоскости Чепмена — Жуге. В силу этого интеграл (11) расходится при $\sigma = \sigma_{sw} = \sqrt{(c^2 - u^2)_{sw}}$, где индекс sw указывает на значения непосредственно за фронтом, и также расходится при $\sigma = \sigma_{max} = \sqrt{(c^2 - u^2)_{max}}$. Следовательно, в интервале $\sigma_{sw} < \sigma < \sigma_{max}$ существует минимум интеграла (11), достигаемый при некотором значении $\sigma = \sigma_*$, которое и указано авторами как определяющее размер ячейки в виде (10). Результаты расчетов [9] для стационарной детонации Чепмена — Жуге значительно превышают экспериментально наблюдаемые значения. Приблизиться к опытным данным удалось при рассмотрении в качестве базового поля течения волны пересжатой детонации, причем оказалось, что степень пересжатия влияет на «акустический» размер ячейки немонотонным образом. С увеличением числа Маха детонационной волны размер ячейки уменьшается, достигает минимума, а затем резко возрастает с выходом на вертикальную асимптоту. Хорошее согласование значений характерного поперечного размера ячейки, рассчитанных исходя из акустической теории, и данных экспериментов в смесях водород — кислород с добавками аргона получено при небольшой степени пересжатия (отношение числа Маха к числу Маха в точке Чепмена — Жуге от 1.05 до 1.2).

В настоящей работе предложенная в [9] методология оценки характерного размера ячейки применяется для детонационного течения гетерогенной смеси кислород — частицы алюминия. Поскольку объемная доля частиц в стехиометрической смеси настолько мала, что позволяет пренебречь влиянием частиц в уравнении состояния газа (2), а в уравнениях (1) члены, зависящие от параметров дискретной фазы, присутствуют только в правой части, то характеристики системы, описывающей течение газа, определяются только параметрами газа. Скорость распространения малых возмущений в смеси равна замороженной скорости звука в газе $c_f = \gamma RT_1$, $\gamma = 1 + R/c_{v,1}$. В силу этого влияние частиц на распространение акустических возмущений происходит только через изменение поля течения газа и распределения c_f .

Для применения вышеописанной методологии решалась задача о структуре стационарной детонационной волны в смеси частиц алюминия и кислорода. Здесь режимы Чепмена — Жуге ($u_k = c_e$, где u_k — скорость смеси в равновесном конечном состоянии, c_e — равновесная скорость звука) не существуют. Нормальной самоподдерживающейся детонации отвечают недосжатые волны, с внутренней звуковой точкой $u_1 = c_f$ [24] и сверхзвуковым конечным равновесным состоянием. Обозначим через $M_w = D_w/c_{f0}$ число Маха скорости нормальной (недосжатой) детонации относительно начального значения скорости звука в газе.

Отметим следующие особенности поля течения в зоне между фронтом замороженной УВ в газе и точкой $u_1 = c_f$, отличающие его от течения газовой детонации [9]. Функция $c_f^2 - u_1^2$ для волны гетерогенной детонации носит более сложный характер, что связано с процессами скоростной и тепловой релаксации фаз. На рис. 9 (толстая линия) показано распределение $\psi(x) = c_f^2 - u_1^2$ для волны нормальной детонации в смеси частиц размером 10 мкм. В отличие от характерной для газовой детонации [9] «полочки» в зоне индукции, здесь функция $\psi(x)$ сначала монотонно возрастает до некоторой точки локального максимума, затем убывает до точки воспламенения. Поведение функции $\psi(x)$ на этом участке определяется характером зависимости $c_f(x)$ (штриховая линия на рис. 9). Первоначальный рост скорости звука за фронтом замороженной УВ обусловлен ро-

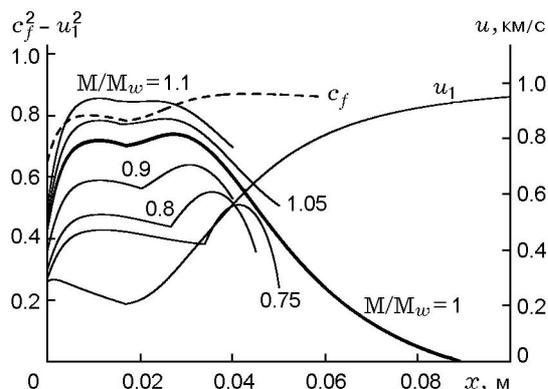


Рис. 9. Поведение характеристических функций в структуре волн нормальной, пересжатой и затухающей детонации

стом температуры за счет выделения тепла в процессе скоростной релаксации. Последующее небольшое убывание происходит, когда преобладающим становится процесс тепловой релаксации фаз и температура газа уменьшается за счет передачи тепла частицам. С началом реакции горения частиц за точкой локального минимума поведение $c_f^2 - u_1^2$ подобно представленной в [9] функции $c^2 - u^2$. Здесь $\psi(x)$ также возрастает (до второй точки локального максимума), а затем убывает до нуля, который достигается при $u_1 = c_f$. Отличие состоит лишь в том, что в недосжатом режиме детонации газозвеси частиц алюминия переход через точку $u_1 = c_f$ наблюдается до окончания процесса химической реакции [24].

Таким образом, в соответствии с результатами [9] не все возмущения из зоны горения достигают лидирующего фронта (и участвуют в формировании ячеек), а только те из них, которые распространяются в определенном направлении (задаваемом константой σ). Здесь интеграл (11) определен на участке, включающем часть зоны горения, только если σ лежит выше точки первого локального максимума $\sigma_{\max 1} = \sqrt{(c_f^2 - u_1^2)_{\max 1}}$, но не превышает значения второго локального максимума $\sigma_{\max 2} = \sqrt{(c_f^2 - u_1^2)_{\max 2}}$. Причем интеграл (2) расходится и при $\sigma = \sigma_{\max 1}$, и при $\sigma = \sigma_{\max 2}$. В промежутке $\sigma_{\max 1} < \sigma < \sigma_{\max 2}$ интеграл конечен, следовательно, имеет минимум, достигаемый при некотором значении σ_* . Интеграл (10) при $\sigma = \sigma_*$ определяет характерный поперечный размер детонационной ячей-

ки. Пределы интегрирования для каждого значения σ из указанного промежутка определяются соответственно работе [9]: $x_1 = x_{sw} = 0$, $x_2 = x_{\sigma^2 = c_f^2 - u_1^2}$.

Результаты расчетов λ_a для базового поля течения, соответствующего волне нормальной (недосжатой) детонации, показаны на рис. 8. Как видно, величина λ_a превышает λ и, кроме того, в зависимости $\lambda_a(d)$ показатель степени $\theta_a = 1.81$ (см. таблицу) отличается от соответствующего (9) показателя $\theta_\lambda = 1.6$, что обуславливает различие в наклоне прямых. Поэтому по аналогии с [9] были рассмотрены течения пересжатой детонации. Оказалось, что изменение числа Маха лидирующей УВ приводит к изменению λ_a , но качественная зависимость λ_a от степени пересжатия иная, нежели в газовой детонации [9]. На рис. 9 показаны распределения $\psi(x) = c_f^2 - u_1^2$ для степеней пересжатия $M/M_w = 1.05$ и 1.1 . Здесь с увеличением числа Маха УВ происходит рост первого локального максимума в распределении $\psi(x)$, а при $M/M_w > 1.04$ значение в точке первого максимума уже превышает значение второго. Величина λ_a соответственно монотонно возрастает с выходом на вертикальную асимптоту. Здесь, как и в газовой детонации, существует критическое значение степени пересжатия, выше которого акустическая теория не дает оценки характерного размера ячейки. В газозвеси частиц алюминия критическое значение M/M_w зависит от размера частиц и близко к 1. В диапазоне рассмотренных размеров частиц ($1 \div 10$ мкм) оказалось, что величина λ_a для пересжатых режимов всегда превышает величину, соответствующую нормальному (недосжатому) режиму.

С учетом того, что вторая фаза распространения фронта ячеистой детонации представляет собой затухающую волну, рассмотрено также распространение возмущений в поле течения затухающей детонации. Параметры течения определялись в рамках квазистационарного приближения, приводящего к системе обыкновенных дифференциальных уравнений, решение которой существует на ограниченном интервале от фронта замороженной УВ до линии записания потока $u_1 = c_f$. Соответствующие распределения $\psi(x)$ для значений $M/M_w = 0.9, 0.8$ и 0.75 также представлены на рис. 9. Видно, что с уменьшением числа Маха зона индукции увеличивается, а макси-

мальные значения уменьшаются, причем величина первого локального максимума уменьшается быстрее, чем второго. В итоге при уменьшении M/M_w величина λ_a уменьшается, достигает некоторого минимального значения в интервале $0.78 < M/M_w < 0.8$, затем снова возрастает. (Значения M/M_w ниже 0.75 нами не рассматривались.) Минимальные значения $\lambda_{a,m} = \min_M(\lambda_a)$ для различных фракций частиц показаны на рис. 8 (штриховая линия). Видно, что они находятся ближе к значениям численных экспериментов, а кроме того, показатель степени в зависимости $\lambda_{a,m}(d)$ равен $\theta_{a,m} = 1.66$ и близок к соответствующему показателю $\theta_\lambda = 1.6$ (см. таблицу). Таким образом, оценки характерного размера ячейки, полученные в акустическом приближении, согласуются с результатами численных экспериментов по формированию ячеистой детонации в каналах не только количественно, но и качественно.

Проведенный анализ подтверждает влияние характерных масштабов всех протекающих в смеси процессов на характерный размер ячейки. Одновременное протекание процессов скоростной и тепловой релаксации определяет величину и положение точки первого локального максимума в зависимости $c_f^2 - u_1^2$, положение точки локального минимума определяется условиями воспламенения, одновременное протекание процессов тепловой релаксации и горения определяет соответственно положение точек поворота «вмороженных» лучей и величину второго локального максимума.

Таким образом, и в рамках аналитического подхода, основанного на анализе распространения акустических возмущений, подтверждается, что в гетерогенной детонации размер детонационной ячейки связан с характерными масштабами всех протекающих в смеси релаксационных процессов, которые включают не только воспламенение и горение частиц, но и процессы тепловой и скоростной релаксации фаз.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках физико-математической модели гетерогенной детонации газозвеси частиц алюминия в кислороде, верифицированной по известным экспериментальным данным, проведено численное моделирование формирования ячеистых структур в каналах при ударно-волновом инициировании.

Путем варьирования ширины расчетной области и сравнения характера структур определены численные значения характерного поперечного размера ячейки. Сравнением результатов расчетов на различных сетках, проведенных двумя численными методами, установлено, что достоверные значения размера ячейки определяются в каналах достаточной большой ширины (порядка нескольких ячеек) из регулярных равномерных структур.

Определены зависимости расчетного размера ячейки и характерных масштабов стационарной одномерной волны нормальной детонации как степенные функции от размера частиц. Сравнительный анализ показателей степени в указанных зависимостях позволяет сделать вывод, что основными масштабами при формировании ячеек являются зоны, характеризующие химические процессы: задержки воспламенения и горения. В гетерогенной детонации эти масштабы, в свою очередь, связаны с процессами скоростной и тепловой релаксации.

Получены оценки характерного размера детонационной ячейки в рамках акустического анализа, которые хорошо согласуются с данными численных экспериментов как по величине, так и по показателю степени в зависимости от размера частиц. Указаны характерные особенности структуры волны гетерогенной детонации, подтверждающие, что на размер ячейки влияют характерные масштабы процессов скоростной и тепловой релаксации фаз.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Strechlov Roger A.** Gas phase detonations: Recent developments // *Combust. Flame*. 1968. V. 12, N 2. P. 81–101.
2. **Васильев А. А., Митрофанов В. В., Топчийн М. Е.** Детонационные волны в газах // *Физика горения и взрыва*. 1987. Т. 23, № 5. С. 109–131.
3. **Oran E.** The structure of propagating detonation // *Gaseous and heterogeneous detonations* / G. Roy et al. (Eds). Moscow: ENAS-Publishers, 1999. P. 97–120.
4. **Nettleton M. A.** Recent work on gaseous detonations // *Shock Waves*. 2002. V. 12. P. 3–12.
5. **Шелкин К. И., Трошин Я. К.** Газодинамика горения. М.: Изд-во АН СССР, 1963.
6. **Митрофанов В. В.** Теория детонации. Новосибирск: НГУ, 1982.
7. **Васильев А. А., Николаев Ю. А.** Модель ячейки многофронтной детонации // *Физика горения и взрыва*. 1976. Т. 12, № 5. С. 744–753.

8. **Desbordes D.** Transmission of overdriven plane detonations: Critical diameter as a function of cell regularity and size // *Dynamics of Explosions (Progress in Astronaut and Aeronaut; V. 114)*. New York: AIAA Inc., 1988. P. 170–185.
9. **Barthel H. O.** Predicted spacings in hydrogen-oxygen-argon detonations // *Phys. Fluids*. 1974. V. 17, N 8. P. 1547–1553.
10. **Shepherd J. E.** Chemical kinetics of hydrogen — air-diluent detonations // *Dynamics of Explosions (Progress in Astronaut and Aeronaut; V. 106)*. New York: AIAA Inc., 1985. P. 263–293.
11. **Gavrikov A. I., Efimenko A. A., Dorofeev S. B.** A model for detonation cell size prediction from chemical kinetics // *Combust. Flame*. 2000. V. 120. P. 19–33.
12. **Khasainov B. A., Veysiere B.** Initiation of detonation regimes in hybrid two-phase mixtures // *Shock Waves*. 1996. V. 6. P. 9–15.
13. **Veysiere B., Ingnoli W.** Existence of the detonation cellular structure in two-phase hybrid mixtures // *Shock Waves*. 2003. V. 12. P. 291–299.
14. **Ingnoli W., Veysiere B., Khasainov B. A.** Study of detonation initiation in unconfined aluminum dust clouds // *Gaseous and Heterogeneous Detonations / G. Roy et al. (Eds)*. Moscow: ENAS-Publishers, 1999. P. 337–350.
15. **Zhang F., Gronig H.** Transition and Structure of Dust Detonations // *Dynamic Structure of Detonation in Gaseous and Dispersed Media / A. A. Borisov (Ed.)*. Kluwer Academic Publ., 1991. P. 157–213.
16. **Khasainov B. A., Veysiere B., Ingnoli W.** Numerical simulation of detonation cell structure in hydrogen-air mixture loaded by aluminum particles // *High-Speed Deflagration and Detonation. Fundamental and Control / G. Roy et al. (Eds)*. Moscow: ELEX-KM Publishers, 2001. P. 163–174.
17. **Benkiewicz K., Hayashi A. K.** Two-dimensional numerical simulations of multi-headed detonations in oxygen — aluminum mixtures using an adaptive mesh refinement // *Shock Waves*. 2003. V. 13. P. 385–402.
18. **Борисов А. А., Хасайнов Б. А., Вейссьер Б. и др.** О детонации взвесей алюминия в воздухе и кислороде // *Хим. физика*. 1991. Т. 10, № 2. С. 250–272.
19. **Nikolis M., Williams D. N., Bauwens L.** Simulaion of detonation cells in wide channel // *Gaseous and Heterogeneous Detonations / G. Roy et al. (Eds)*. Moscow: ENAS-Publishers, 1999. P. 153–162.
20. **Hemeryck L., Lefebvre M. N., Van Tiggelen P. J.** Numerical investigation of transient detonation waves // *High-Speed Deflagration and Detonation. Fundamental and Control / G. Roy et al. (Eds)*. Moscow: ELEX-KM Publishers, 2001. P. 81–96.
21. **Strauss W. A.** Investigation of the detonation of aluminum powder-oxygen mixtures // *AIAA Journal*. 1968. V. 6, № 12. P. 1753–1761.
22. **Еремеева А. Е., Медведев А. В., Федоров А. В., Фомин В. М.** К теории идеальной и неидеальной детонации аэросуспензий. Новосибирск, 1986. (Препринт /АН СССР. Сиб. отделение. Ин-т теор. и прикл. механики; № 37–86).
23. **Федоров А. В.** Структура гетерогенной детонации частиц алюминия, диспергированных в кислороде // *Физика горения и взрыва*. 1992. Т. 28, № 3. С. 72–83.
24. **Fedorov A. V., Fomin V. M., Khmel' T. A.** Non-equilibrium model of steady detonations in aluminum particle — oxygen suspensions // *Shock Waves*. 1999. V. 9, N 5. P. 313–318.
25. **Федоров А. В., Хмель Т. А.** Численное моделирование ударно-волнового инициирования гетерогенной детонации аэровзвеси частиц алюминия // *Физика горения и взрыва*. 1999. Т. 35, № 3. С. 81–88.
26. **Федоров А. В., Хмель Т. А.** Численное моделирование инициирования детонации при вхождении ударной волны в облако частиц алюминия // *Физика горения и взрыва*. 2002. Т. 38, № 1. С. 114–122.
27. **Хмель Т. А., Федоров А. В.** Взаимодействие ударной волны с облаком частиц алюминия в канале // *Физика горения и взрыва*. 2002. Т. 38, № 2. С. 89–98.
28. **Dreizin E. L.** On the mechanism of asymmetric aluminum particle combustion // *Combust. Flame*. 1999. V. 117. P. 841–850.
29. **Бойко В. М., Киселев В. П., Киселев С. П. и др.** О взаимодействии ударной волны с облаком частиц // *Физика горения и взрыва*. 1996. Т. 32, № 2. С. 86–99.
30. **Harten A.** High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // *J. Comput. Phys*. 1983. V. 49. P. 357–393.
31. **Роуч П.** Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980.
32. **Хмель Т. А.** Численное моделирование двумерных детонационных течений в газовой взвеси реагирующих твердых частиц // *Мат. моделирование*. 2004. Т. 16, № 6. С. 73–77.

Поступила в редакцию 5/VII 2004 г.