

8. Bennet L., Iyer K., Sorrell F., Horie Y. Shock induced exothermic reactions in powder mixtures // Shock Compression of Condensed Matter. — Elsevier Sci. Publishers, 1992. — P. 605.
9. Гоголя М.Ф., Воскобойников И.М., Долгобородов А.Ю. и др. Взаимодействие серы с металлами при ударном нагружении // Хим. физика. — 1991. — 10. — С. 420.
10. Batsanov S.S. The concept of electronegativity and structural chemistry // Sov. Sci. Rev. B. Chem. Rev. — 1990. — 15, Pt. 4. — P. 3.
11. Шевцова Н.Н., Темницкий И.Н., Бацанов С.С. Ударный синтез α - β - модификаций GeSeTe // ЖНХ. — 1987. — 32. — С. 2596.
12. Бацанов С.С. Неорганическая химия высоких динамических давлений // Усп. химии. — 1986. — 55. — С. 579.
13. Шубитидзе С.О., Набатов С.С., Якушев В.В. и др. Измерение электропроводности системы Sn + S в ампуле сохранения при ударно-волновом воздействии // Детонация и ударные волны. — Черногловка: ИХФ АН СССР, 1986. — С. 19.
14. Набатов С.С., Шубитидзе С.О., Якушев В.В. Использование явления термоЭДС в полупроводниках для изучения экзотермических процессов в ампуле сохранения // ФГВ. — 1990. — 26, № 6. — С. 114.

141570, Менделеево,
 Центр высоких динамических
 давлений НПО «ВНИИФТРИ»

Поступила в редакцию
 21/IV 1993

УДК 534.222.2 + 662.215. 1

А.П. Ершов

ИЗОТЕРМИЧЕСКАЯ ДЕТОНАЦИЯ И ЕЕ СТОХАСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Представлена изотермическая модель, с разумным приближением описывающая детонацию в стесненных условиях, например в пористой среде. Показано, что такая детонация может качественно анализироваться стохастическим методом клеточных автоматов.

Длительное время сохраняется интерес к детонационным процессам, в которых заметны отклонения от классической модели Зельдовича — Неймана — Деринга. К таким режимам относятся двухфазная низкоскоростная детонация в пористых взрывчатых веществах (ВВ) [1, 2] с плавным ростом давления, во многом подобный процесс в малоплотных взвесах ВВ в микропористых матрицах [3] и газовая детонация в пористой среде [4]. В жесткой пористой среде получены гетерогенная детонация систем топливо — окислитель и детонация ВВ [5—7].

Авторы [1—7] связывают распространение процессов не с ведущей ударной волной, а с поджиганием струями горячих продуктов горения. Такие процессы существенно отличаются от классической детонации. Очевидна uselessность таких процессов, в первую очередь из-за сильного взаимодействия фаз. Поэтому оправданы усилия в направлении построения хотя бы качественной, по возможности простой теории.

В данной работе предпринята попытка построения теории «изотермической» детонации, основанной на пренебрежении изменениями температуры продуктов горения в реакционной зоне. В результате удается избавиться от уравнения энергии и значительно упростить анализ. Роль тепловыделения Q в такой постановке переходит к массовыделению J .

Существует также потребность в подходящих методах моделирования. Распространенные континуальные методы расчета мало подходят к описанным задачам. В работе демонстрируется применение стохастического метода «решеточного газа» [8], называемого также методом клеточных автоматов, к проблеме изотермической детонации. Получены качественные модели сложных неоднородных течений.

Постановка задачи

Рассматривается низкоскоростная детонация в пористой среде, состоящей из жестких частиц, способных гореть с поверхности. Толщиной слоев уже испарившегося, но еще не сгоревшего вещества по сравнению с размером

© А.П. Ершов, 1994.

частиц пренебрегается. Напротив, протяженность зоны реакции в направлении распространения волны может быть велика. Дальнейшее изложение относится именно к усредненной структуре этой зоны. Плотность образующихся газов мала по сравнению с плотностью конденсированного вещества, так что продукты горения можно считать идеальным газом. Это возможно, если выгорающий слой невелик.

В действительности в пористом ВВ [1, 2] наблюдается некоторая деформация скелета ($\sim 10\%$), которая, однако, не приводит к существенному перекрытию пор. В [7] деформация исключена (ВВ наносилось в виде мелкодисперсного порошка на поверхность стальных шариков, образующих пористый каркас), но возможен срыв ВВ со стенок пор и перемешивание с газовым потоком. Таким образом, рассматриваемая модель является идеализацией известных постановок.

В зоне горения резко увеличивается плотность газовой фазы. Растет и давление, столь же резко по сравнению с начальным, однако не в такой степени, чтобы вызвать заметные деформации скелета. Температура же продуктов горения в зоне реакции меняется в гораздо более узких пределах. Действительно, в однофазной детонационной волне выделение тепла реакции приводит к нагреву среды, чем и определяется рост температуры. В рассматриваемой же системе основной разогрев происходит при горении в тонких пограничных слоях, которые исключаются из рассмотрения. В поровое пространство поступают уже «готовые» продукты горения. Этот процесс обеспечивает в зоне реакции своего рода термостат. Влияние на температуру изменяющихся условий (давления, плотности) в зоне реакции невелико. Из-за затрудненности движения в пористой среде внутренняя энергия не может перейти и в кинетическую.

За зоной реакции температура будет спадать из-за теплоотвода в скелет. Однако этот спад сравнительно медленный. В зоне горения роль теплоотвода имеет порядок отношения объема пограничных слоев к объему пор.

Разумеется, постоянство температуры не является точным. Приведенные аргументы показывают лишь, что изменения температуры менее существенны по сравнению с более резкими изменениями плотности и давления. В первом приближении поэтому можно строить модель процесса без учета колебаний температуры. Далее даются оценки отклонения от изотермичности.

Одномерное описание изотермической детонации

Одномерные уравнения в принятых предположениях имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} &= j, \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} &= -f. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь ρ — плотность газовой фазы; u — скорость потока относительно скелета; p — давление в газе. Все величины понимаются как средние по представительному объему. Правые части (j и f) обозначают приток массы в газовую фазу и трение соответственно. Уравнение энергии в принятом приближении не участвует, заменяясь изотермической зависимостью $p = c^2 \rho$, где c — изотермическая скорость звука. Уравнения (1) записаны в лабораторной системе (связанной с каркасом), выделенность которой очевидна. Считается, что поступающий газ имеет нулевую скорость и не дает вклада в импульс. Пористость из-за малости выгорающего объема постоянна, поэтому не входит в (1).

Как обычно для теории детонации рассмотрим стационарные волны вида $\rho = \rho(x - Dt)$, $u = u(x - Dt)$, распространяющиеся с постоянной скоростью D . Рассмотрим случай, когда реакция включается ударной волной (УВ) в газе. Предположение об изотермичности не распространяется на

состояние перед волной, т.е. исходная скорость звука $c_0 < c$. Из (1) после интегрирования в пределах от произвольного значения стационарной переменной $\xi = x - Dt < 0$ до фронта волны ($\xi = 0$) получаем

$$\rho(D - u) = \rho_0 D + J, \quad J = \int_{\xi}^0 j dx, \quad (2)$$

$$p = p_0 + F + \rho u(D - u), \quad F = \int_{\xi}^0 f dx,$$

где ρ_0 — плотность газовой фазы в порах перед волной; $p_0 = c_0^2 \rho_0$. Интегралы J и F в принятых предположениях положительны. Исключая скорость u и вводя удельный объем $v = 1/\rho$, получаем

$$p = p_0 + F + D \left(\frac{D}{v_0} + J \right) - v \left(\frac{D}{v_0} + J \right)^2. \quad (3)$$

Выразим давление через объем:

$$p = c^2/v. \quad (4)$$

Выражение (3) получено только из уравнений массы и импульса и не зависит от предположения об изотермичности. При заданных D , J и F оно задает на плоскости $p-v$ прямую с отрицательным наклоном, которая при положительном J и не слишком большом F имеет, вообще говоря, две точки пересечения с гиперболой (4) (рис. 1). Эта гипербола при $c > c_0$ проходит выше точки, отвечающей исходному состоянию перед волной: $p_0 = c_0^2/v_0$.

Сразу отметим, что сходство графиков с классической картиной в большой степени внешнее. Прямая (3) не является прямой Рэлея — Михельсона: по мере поступления массы состояние газа не меняется вдоль нее. Скорее линия (3) — это аналог детонационной адиабаты; на нее точка, изображающая состояние газа, попадает, только набрав определенные значения J и F . Поэтому указанную прямую будем называть детонационной адиабатой. В процессе эволюции изображающие точки движутся по гиперболе состояния $p = c^2/v$. Но и эта линия не будет аналогом ни детонационной адиабаты, ни линии Рэлея, так как на ней находится вообще любое состояние за волной, в том числе и вне стационарной зоны.

Тем не менее физически задача подобна классической. Приток массы J , в результате которого волна является самоподдерживающейся, аналогичен теплу реакции Q , тогда как трение F определяет потери. Разумеется, употребление термина «адиабата» для описанной модели в известной степени противоречиво.

В волне с растущей плотностью возможны два пересечения адиабаты с гиперболой либо касание. В случае пересечения при данной скорости волны D состояние газа находится сразу из (3), (4):

$$v = \tilde{v}_0 \frac{2c^2}{S \pm \sqrt{S^2 - 4c^2(D + Jv_0)^2}}, \quad (5)$$

где $S = c_0^2 + Fv_0 + D(D + Jv_0)$. По мере нарастания J и F состояние газа изменяется вдоль гиперболы состояния согласно (5). Решение благодаря простоте модели получается в явном виде.

При определенных J_e и F_e (скажем, соответствующих окончанию реакции) существует скорость волны D , при которой осуществляется касание гиперболы состояния и ударной адиабаты. Для этого

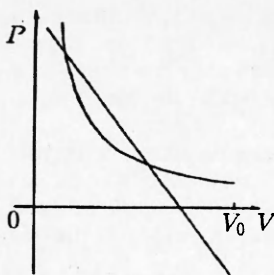


Рис. 1. Пересечение адиабаты с гиперболой.

выражение под корнем в (5) должно обращаться в нуль. Легко видеть, что при касании

$$D = c - J_e v_0 / 2 + \sqrt{(c - J_e v_0 / 2)^2 - c_0^2 - F_e v_0 + 2c J_e v_0},$$

$$u = v_0 c / (D + J_e v_0), \quad p = c(J_e + D/v_0), \quad (6)$$

$$D - u = c.$$

Для рассматриваемых детонационных режимов следует выбирать в первом равенстве (6) знак плюс перед корнем (знак минус, как правило, дает нефизическое $D < 0$). Из последнего равенства видно, что, как и в классической теории, при касании в волне будет существовать точка Чепмена — Жуге, разделяющая дозвуковую относительно волны и сверхзвуковую области течения.

В практически интересной ситуации, когда $J_e \gg c/v_0$, т.е. массой начального газа можно пренебречь по сравнению с притоком продуктов реакции, из (6) получаем $D = 2c - F_e/J_e$: всегда $D < 2c$. Естественно требовать $D > c$, откуда имеем $F_e < cJ_e$. При невыполнении этого условия любые возмущения будут догонять волну, и ее стационарное распространение невозможно. Неравенство $F_e < cJ_e$ будет критерием существования самоподдерживающейся волны (потери не слишком велики).

Из (6) в предположении $J_e \gg c/v_0$ следует $p_e \approx cJ_e$. Изотермичность — следствие преобладающей роли трения, которое практически уравнивает градиент давления при малой скорости u . Тогда из (2) $p_e \approx F_e$. Следовательно, в этом приближении $F_e \approx cJ_e$ и $D \approx c$.

Оценим изменения температуры в зоне реакции. В континуальной одномерной постановке уравнение энергии имеет вид

$$\frac{\partial \rho(\epsilon + u^2/2)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u(\epsilon + u^2/2) + pu)}{\partial x} = j\dot{Q} - q.$$

Здесь ϵ — внутренняя энергия единицы массы; Q — тепло реакции; q — скорость теплоотвода в скелет. Для стационарной волны со скоростью D интегрирование в пренебрежении q дает

$$\rho(D - u) \left(\epsilon + \frac{u^2}{2} \right) = JQ + \rho u + D\rho_0 \epsilon_0.$$

С учетом сохранения массы после элементарных преобразований получаем

$$\epsilon = Q + \frac{\rho_0 D}{\rho_0 D + J} (\epsilon_0 - Q) + \frac{\rho u}{\rho_0 D + J} - \frac{u^2}{2}.$$

В первом приближении $\epsilon = Q$. Для идеального газа это и означает изотермичность: $\epsilon = \epsilon(T)$. Все слагаемые, кроме первого, в правой части малы. При $J \gg \rho_0 D$ второе слагаемое имеет порядок ρ_0/ρ . Основная ошибка приближения определяется слагаемым, пропорциональным ρu (работа сил давления). Так как $p \approx c^2 \rho$, $J \approx \rho c$, вклад работы будет порядка cu .

Поскольку в загроможденной среде приблизительно балансируются градиент давления и сила трения, $p/L \sim f \approx \rho u^2/d$, где L — характерный размер (длина зоны реакции); d — характерный размер пор или частиц скелета; $u \sim c\sqrt{d/L}$. Применимость континуального приближения предполагает, что множитель под корнем мал. В результате ошибка имеет порядок $c^2\sqrt{d/L}$. Принимая энергию в виде $\epsilon = c^2/(\gamma - 1)$, где γ — показатель адиабаты, и учитывая, что $c^2 \sim T$, получаем относительную ошибку приближения: $\Delta T/T \approx (\gamma - 1)\sqrt{d/L}$. Например, при $L = 10d$, $\gamma \approx 1,3$ точность изотермического приближения $\approx 10\%$. Кинетическая энергия $u^2/2$ тем более мала.

Таким образом, вместе с оценкой точности приближения получаем значение скорости звука $c^2 = (\gamma - 1)Q$. Равенства $\epsilon \approx Q$ следовало ожидать,

поскольку в стесненных условиях реакция практически идет при постоянном объеме. Для газовой детонации в пористой среде приближенное постоянство объема отмечено в [4].

Континуальное моделирование одномерной волны

Поскольку правые части уравнений зависят от решения, результаты предыдущего раздела говорят лишь о возможности описанного режима. Продемонстрировать его реальность можно в полной нестационарной постановке. Для анализа структуры волны и ее развития из заданных начальных условий численно решались уравнения (1).

Применена эйлерова разностная схема Лакса — Вендроффа. Неоднородные члены аппроксимировались с сохранением второго порядка точности. Фронт УВ выделялся и рассчитывался с учетом условий на разрыве и на догоняющей характеристике. Точки, примыкающие к фронту волны, которые не поддаются процедуре Лакса — Вендроффа, рассчитывались по специальному алгоритму [9]. В расчетах принималось $c = \sqrt{3}/7$ (как в решеточной модели, излагаемой далее); расчетная область $0 \leq x \leq 200$. Пространственный шаг $h = 1$ понимался так же, как характерный внутренний размер пористой среды d .

Скорость реакции задавалась в виде $j = j(t_f)$ ($t_f(x)$ — время, прошедшее с момента, когда УВ прошла через данную точку x) в двух вариантах. В первом $j = C_j/t_f$ в течение времени реакции t_f (C_j — коэффициент, регулирующий интенсивность массоприхода). Такая зависимость моделирует постоянную скорость выделения массы за УВ в течение времени реакции, затем спадающую до нуля. В конце зоны реакции (при $0,8t_f < t_f < 1,2t_f$) эта ступенчатая функция сглаживалась аналогично [9]. Использовалась также экспоненциально спадающая за фронтом скорость массовыделения: $j = (C_j/t_f) \cdot \exp(-t_f/t_f)$. Сила трения принималась в виде $f = C_f \rho u^2/d$; $C_f \sim 1$ — коэффициент сопротивления.

В начальном состоянии задавалась повышенная плотность при $0 \leq x \leq 20$. При распаде разрыва возникала УВ, за которой начиналась реакция. Постепенно волна выходила на стационарный режим, в котором скорость D стабилизировалась. На рис. 2, а изображен профиль волны в два момента времени, а на рис. 2, б — картина на плоскости $p-v$ для конечного момента $t = 200$ при $C_j = 3$, $C_f = 1$ и квазипостоянной скорости реакции. На профилях (а) вертикальная черта отмечает точку перехода через скорость звука. Значения J_e и F_e вычислялись по области между фронтом волны и звуковой точкой. С точностью рисунка происходит касание детонационной адиабаты, проведенной по этим значениям и известной скорости волны ($D = 1,163$ с в данный момент), с гиперболой состояния. Точка Жуге

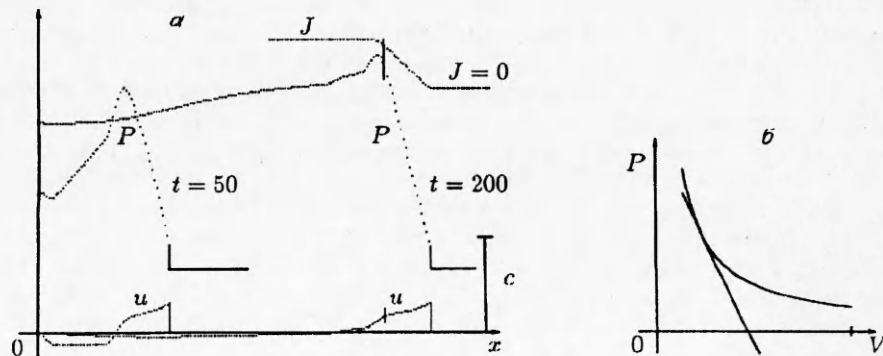


Рис. 2. Расчет изотермической детонации по континуальной модели.

а — профили давления и скорости; б — расположение адиабаты и гиперболы состояния при $t = 200$ (метка на горизонтальной оси — начальный объем φ).

соответствует почти полному выгоранию. Для экспоненциально спадающей за фронтом скорости реакции и тех же прочих данных точка Жуге находится определенно внутри зоны реакции.

Вариант расчета выбран таким образом, чтобы продемонстрировать и ударную волну, и рост давления за ней. Более реальна постановка с малой начальной плотностью (или интенсивным горением), при которой скачок в УВ незначителен. Роль ударной волны тогда сводится к включению реакции, что на практике обеспечивается неоднородностью течения (струйным механизмом).

В расчетах горение имело «безусловный» характер. Нетрудно ввести срыв реакции, скажем, по достижении некоторого значения напряжений или теплового потока в пограничном слое. Тогда в зависимости от трения можно получить условие развития самоподдерживающейся волны. Учет теплоотвода приведет к более быстрому спаду давления.

Стохастическая модель клеточных автоматов

Континуальный подход, основанный на усреднении характеристик газовой фазы, не учитывает флуктуаций течения и случайных факторов, например в распределении пор. Хотя кинетическая энергия как среднего движения, так и пульсаций в пористой среде невелика, усреднение может приводить к неверным качественным выводам. Как отмечалось, например, в [10], средняя скорость в системе волны направлена от свежей смеси к продуктам реакции. Поэтому нельзя описать режимы, в которых реакция распространяется струями, поджигающими горючее впереди основного фронта волны. Между тем во многих двухфазных системах именно такой механизм не вызывает сомнений [1—7].

Метод клеточных автоматов (cellular automata), называемый также методом решеточного газа (lattice gas), позволяет качественно учитывать флуктуации, описывая движение на микроскопическом уровне, но с минимальной подробностью. Имеется опыт успешного применения этого подхода в разнообразных задачах механики сплошной среды [11]. Здесь ограничимся кратким описанием основ подхода. Более подробное изложение можно найти в [8, 12], а также в обзоре автора [13].

Решеточный газ состоит из одинаковых частиц, способных двигаться по плоской решетке. За шаг по времени частица перемещается на единичное расстояние — из одного узла решетки в соседний. В узлах частицы могут рассеиваться друг на друге. Полный цикл расчета состоит из перемещения атомов по связям между узлами и рассеяния в узлах.

Известно [8], что в двух измерениях наилучшая решетка — покрытие плоскости равносторонними треугольниками, так что из одного узла выходит шесть связей (рис. 3). В каждом узле может находиться от нуля до шести атомов, причем все направления скоростей должны быть различными. Возможно наличие также одного неподвижного атома. На рис. 3 показаны правила рассеяния для конфигураций, изменяющихся при взаимодействии в узлах. Остальные конфигурации не взаимодействуют. При лобовом столкновении результат выбирается из возможных случайным образом, что вносит в расчет стохастичность.

Как показано в ряде работ [8, 12], в среднем описанная система обладает свойствами, близкими к свойствам газа. Если плотность частиц ρ и скорость течения u , усредненные по представительному малому объему, меняются достаточно медленно (континуальный предел), то для простейшей 6-битовой модели без покоящейся частицы [8] выполняются уравнения

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_k)}{\partial x_k} = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial[\rho g(\rho) \cdot (u_i u_k - (u^2/2)\delta_{ik})]}{\partial x_k} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}$$

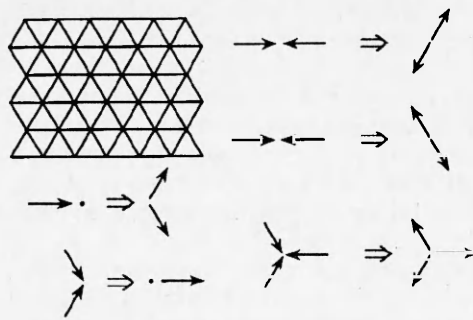


Рис. 3. Геометрия решетки и схемы соударений.

с точностью до членов, содержащих u^2 , включительно. Эти уравнения напоминают уравнения неразрывности и Навье — Стокса для сжимаемого газа; $p = \rho/2$, т.е. решеточный газ моделирует изотермическую среду $c = 1/\sqrt{2}$. Вязкие напряжения имеют в общем стандартный вид, а коэффициент вязкости порядка 1. Следовательно, шести направлений оказывается достаточно, чтобы поток импульса был вращательно инвариантным. Квадратная решетка не обладает таким свойством.

Однако плотность потока импульса содержит паразитный множитель $g(\rho) = (3 - \rho)/(6 - \rho)$ и слагаемое $-\rho g(\rho) (u^2/2)\delta_{ik}$, которое иногда включают в уравнение давления. Фактор $g(\rho)$ нарушает галилееву инвариантность, что связано с наличием преимущественной системы отсчета (решетки).

Таким образом, решеточный метод рассматривает течение как усредненный результат крайне простых взаимодействий в специальном микромире. В памяти компьютера состояние узла занимает менее одного байта. Все операции по существу логические; медленная вещественная арифметика не употребляется. В принципе отсутствуют «счетные» неустойчивости, приводящие к переполнению в разностных вычислениях. В модели содержится источник случайности, существенной для многих процессов.

В то же время модель дает довольно грубое описание течения. Аппроксимируются не точные уравнения газодинамики, а несколько искаженная система (7). В простейшей модели жестко фиксирована температура. Можно заключить, что результаты подхода будут в основном качественными.

Между тем для рассмотренной выше детонации в пористой среде недостатки модели малосущественны. Изотермичность свойственна самому процессу. Скелет задает преимущественную систему отсчета. Скорость течения из-за трения невелика, так что плохое описание динамической части потока импульса не критично. Поэтому были предприняты расчеты «решеточной» детонации в пористой среде. Использовалась 7-битовая модель с одной покоящейся частицей (рис. 3), для которой $c = \sqrt{3/7}$, а фактор g в дифференциальном приближении (7) имеет вид $g = 7(3,5 - \rho)/6(7 - \rho)$.

Поступление массы и трения моделировались дополнительными правилами. По окрестности текущей точки, включающей шесть ее ближайших соседей, вычислялась величина $(\rho u)^2$. Если она превосходила определенный предел (в описанных ниже расчетах — единицу), то в точке могла в принципе «родиться» новая частица. Направление ее скорости выбиралось случайным образом так, чтобы оно не коррелировало со средней скоростью в окрестности (т.е. в среднем поступление газа «продуктов» не меняло импульса потока). Если же рассматриваемый узел был уже полностью «населен», новая частица не образовывалась. Такой алгоритм аналогичен модели срыва поверхностного слоя [2] и может давать заметную скорость реакции в довольно узкой зоне, примыкающей к фронту волны.

Трение моделировалось случайной сменой направления скоростей частиц. Частица «забывала» направление скорости в одном случае из 10, что соответствует среднему закону трения $f = \rho u/10$. Таким образом, цикл расчета состоял из четырех шагов — скачок по связям, рассеяние, рождение новых частиц, трение — вместо двух в исходной постановке [8].

Трение моделировалось случайной сменой направления скоростей частиц. Частица «забывала» направление скорости в одном случае из 10, что соответствует среднему закону трения $f = \rho u/10$. Таким образом, цикл расчета состоял из четырех шагов — скачок по связям, рассеяние, рождение новых частиц, трение — вместо двух в исходной постановке [8].

Результаты расчетов

Расчеты проводились на сетке 151×101 . При $x = 0$ и 150 задавалось условие непротекания, граничные условия по координате y — периодические. В начальный момент времени задавался разрыв — область повышенного давления при $0 \leq x \leq 25$, имитирующая инициирующее воздействие. При распаде разрыва образовывались УВ и волна разрежения, обращенная в обратную сторону. Подбором начальных условий и порога горения можно добиться незатухающего распространения процесса за счет его поддержки притоком массы в зоне реакции.

На рис. 4 показан пример развития детонации для начальной плотности 0,3 и плотности в секции высокого давления 3,0. В верхней части кадров

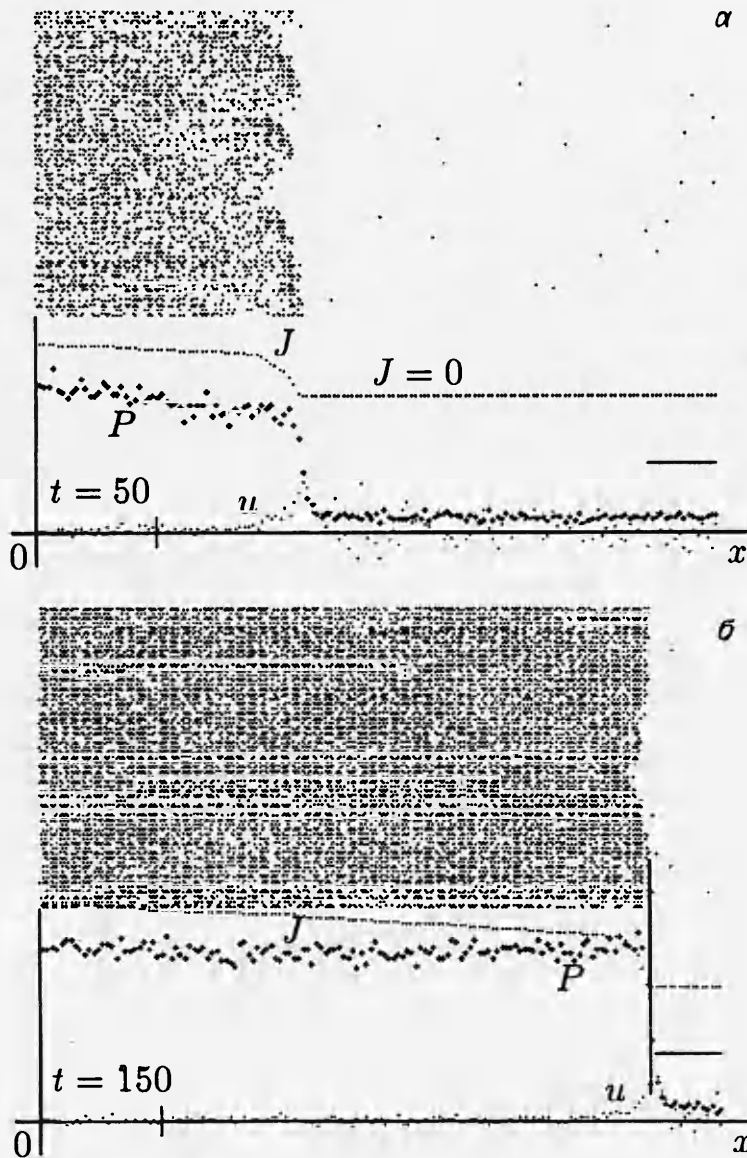


Рис. 4. Детонация в решеточном газе.

$a - t = 50$; $b - t = 150$; вертикальная линия — локализация фронта по максимальному перепаду давления (метка на оси x — начальное положение разрыва).

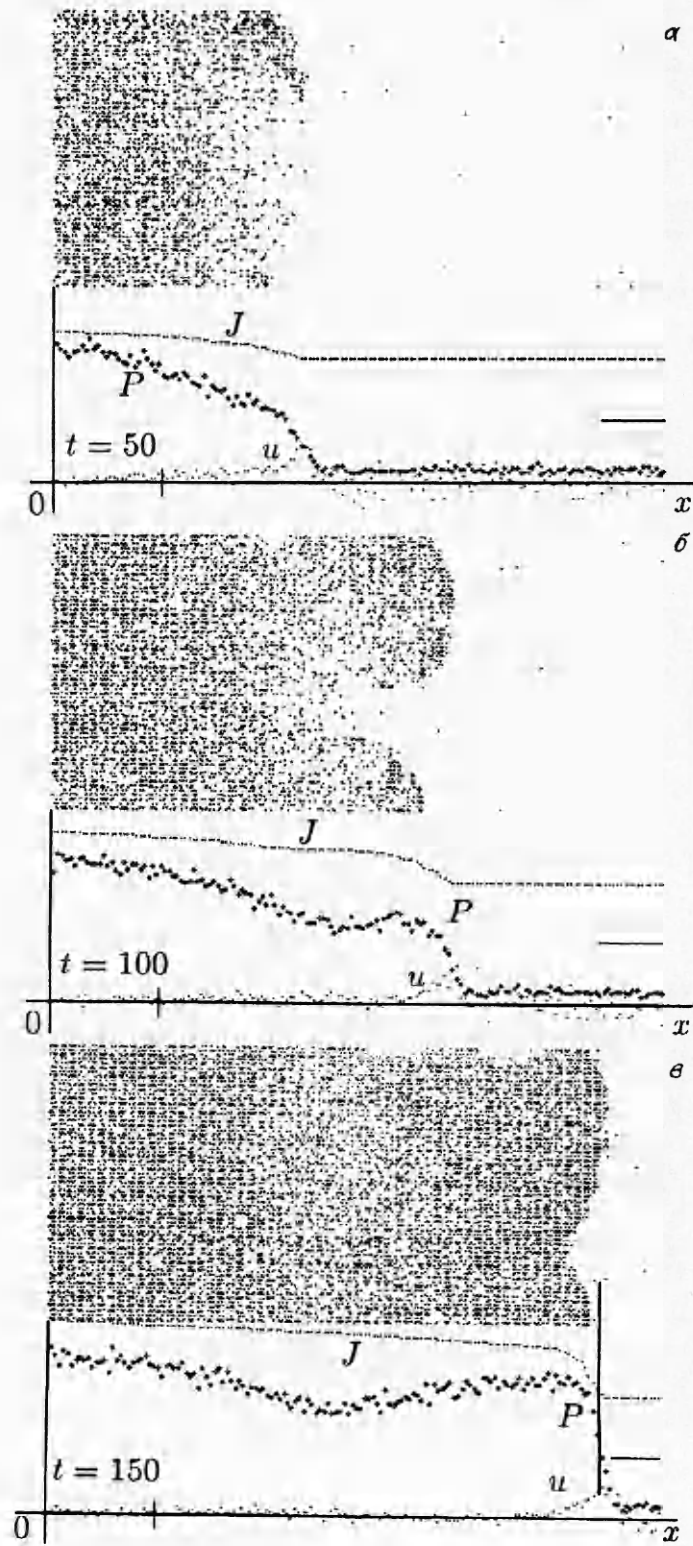


Рис. 5. Развитие детонации, включающее образование «языка».

приведено распределение плотности (показаны точки, в которых $\rho \geq 3$), в нижней — графики давления и массовой скорости, полученные усреднением по вертикальной координате, а также интегрального массовыделения J за один шаг во времени. График J приподнят над осью x на величину, в масштабе рисунка равную инициирующему давлению. Горизонтальная линия в правой части кадра указывает масштаб скорости звука c .

Волна имеет крутой фронт и примерно постоянную скорость $D \approx 1,14c$. Основное выделение массы происходит во фронте, где массовая скорость сравнима с c . Из-за малой начальной плотности и ограниченного поперечного размера усредненная скорость течения перед волной имеет заметные флуктуации. Фронт волны не плоский, на нем заметны стохастические неоднородности, особенно на начальных стадиях. Далее течение приближается к одномерному, но сохраняются флуктуации более мелкого масштаба. С небольшой скоростью реакция продолжается и вдали от фронта, чем объясняется отсутствие спада давления (ср. с рис. 2).

Другая реализация движения при макроскопически тех же начальных условиях показана на рис. 5. Здесь реакция развивается вначале в «языке», занимающем примерно половину сечения. Со временем фронт также выравнивается.

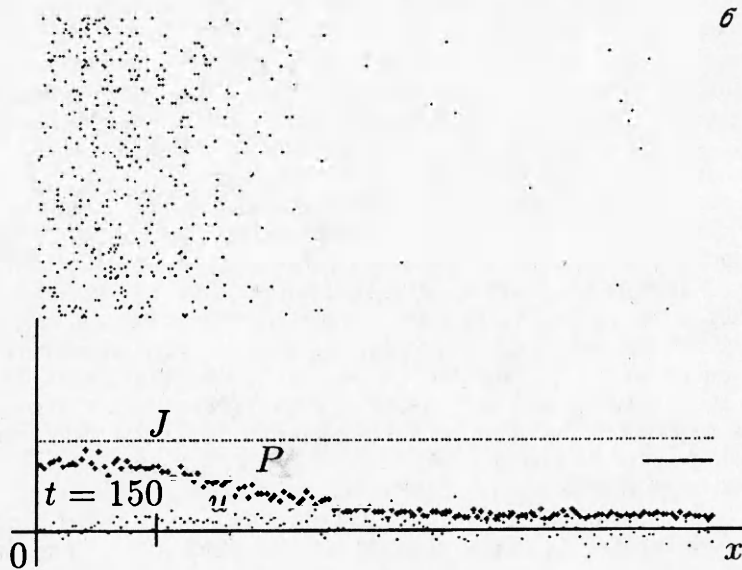
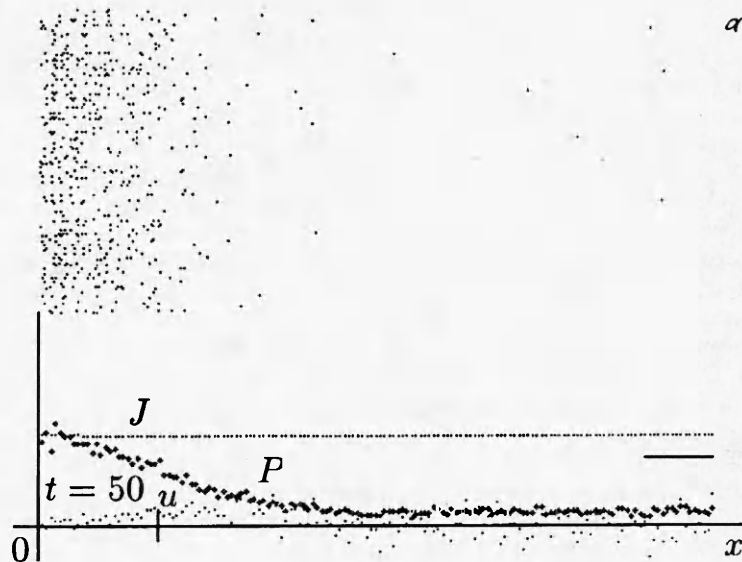
Неоднородности фронта и представляют собой струи, прорывающиеся вперед и вызывающие реакцию. В таких струях скорость течения может превышать среднюю скорость распространения волны. Визуализация областей с высокой ($u_x \geq c$) скоростью течения показала, что они окаймляют спереди «языки» плотности. Именно в этих граничных областях в основном идет реакция. Даже в волне, близкой к одномерной, статистический характер закона горения приводит к возможности реакции за счет конвективного механизма на малых местных неоднородностях, хотя в среднем поток в системе волны направлен назад.

Описанные расчеты близки к критическим. При ослаблении инициирующего воздействия детонация с резким фронтом не развивается. На рис. 6, а, б показано затухание волны при пониженном инициирующем давлении (плотность 2 вместо 3). Реакция практически не идет и начальный разрыв размывается. На рис. 6, в, г демонстрируется эффект повышения начальной плотности до 1. Полученный режим можно интерпретировать как быстрое конвективное горение со скоростью волны порядка $0,5c$. Здесь заметное противодействие не позволяет развиться высоким скоростям и детонации с резким фронтом, однако скорость реакции достаточна для распространения очень плавной волны.

Обсудим применимость дифференциального приближения (7) (которое получено для почти несжимаемых течений) для описания процессов с резкими изменениями состояния. Фактор g , меняющий знак при половинном заполнении, искажает структуру потока импульса. При $g = 0$ имеет место предельный случай акустики; отклонения от акустики и при $g > 0$ ($\rho < 3,5$) невелики. Для системы (7) максимально возможная скорость УВ может превышать c на несколько процентов. При больших плотностях ($g < 0$) возникают ударные волны разрежения [13].

Для анализа работоспособности дифференциального приближения (7) проведены одномерные расчеты континуального типа (подобные описанным для системы (1)). Оказалось, что поведение системы совершенно нереалистическое. Поскольку D практически фиксирована, выделение массы за фронтом не компенсируется его смещением, и плотность на фронте быстро растет. После достижения значения $\rho = 3,5$ скорость волны $D < c$, на заднем фронте образуется ступенька разрежения. Разумеется, такое поведение не имеет физического смысла.

В модели же клеточных автоматов движение всегда имело физически разумный характер, следовательно, недостатки первого приближения не свойственны решеточной модели как таковой. При выходе за границы



применимости (7) модель ведет себя лучше, чем низкоскоростное дифференциальное приближение.

Обсуждение результатов

Изотермическая модель предсказывает величину скорости детонации $D \approx \sqrt{(\gamma - 1)Q}$. Такой результат для режима, предельного по потерям, получен в [14], причем использовалось уравнение энергии. В данной работе показано, что режимы детонации в стесненных условиях автоматически близки к предельным, а также отмечена приближенная изотермичность зоны реакции, что значительно упрощает анализ.

Характерная величина скорости D для всех ВВ близка к 1 км/с. Экспериментальные данные имеют заметный разброс вокруг этого значения, чего и следовало ожидать из-за приближенности модели.

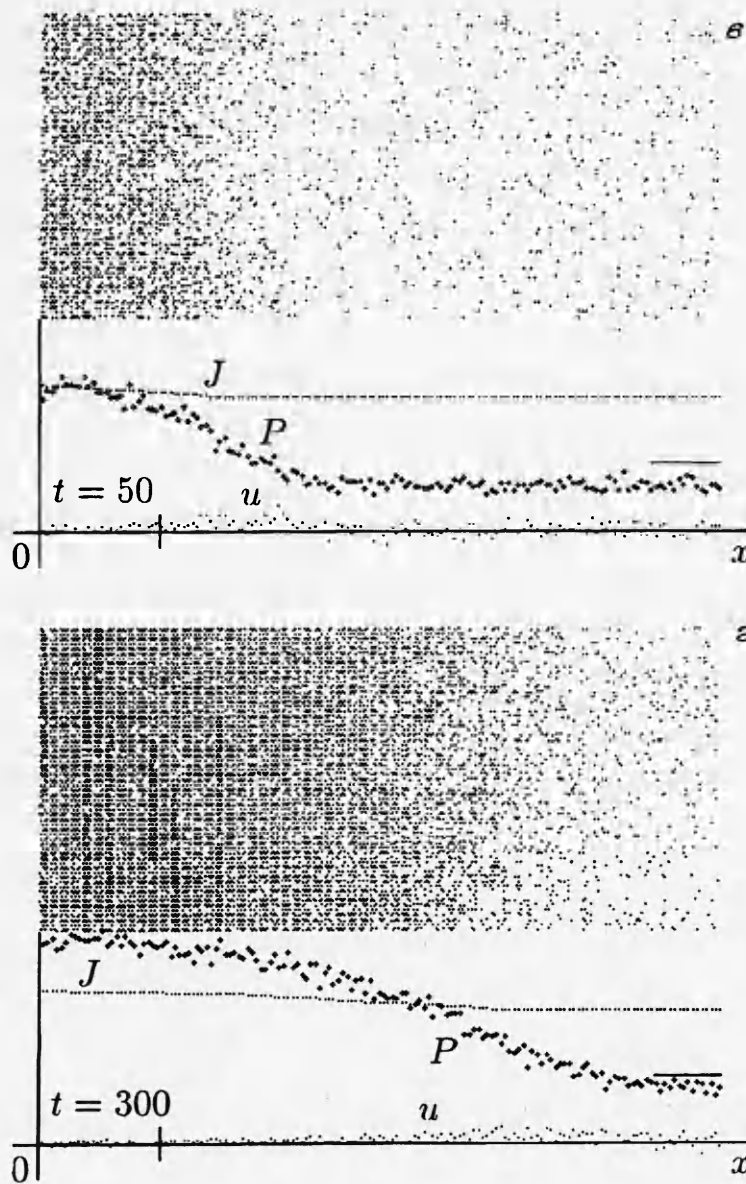


Рис. 6. Затухающая волна при слабом инициировании (а, б) и горение с плавным фронтом при повышенном начальном давлении (в, г).

Есть основания предполагать, что модель может быть модифицирована для описания систем типа конденсированное горючее — газообразный окислитель. В этом случае среднemasсовая температура, разумеется, не постоянна, но однозначно определяется прореагировавшей долей топлива.

Расчеты решеточных течений носят предварительный характер, однако несомненно полезность этого подхода для понимания процесса на уровне механики. Для применения к реальным системам необходим учет физики, в частности в законе горения.

Автор благодарен В.В. Митрофанову и Л.А. Лукьянчикову за полезные обсуждения.

