

ВОЗНИКНОВЕНИЕ ДЕТОНАЦИИ В ОБЛАСТЯХ С НЕОДНОРОДНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ТЕМПЕРАТУРЫ И КОНЦЕНТРАЦИИ

*Б. Е. Гельфанд, С. М. Фролов, А. Н. Поленов, С. А. Цыганов
(Москва)*

Опыт эксплуатации различных систем сжигания топлива показывает, что в некоторых случаях их работа сопровождается взрывными явлениями. Например, хорошо известно, что при определенных условиях смещения в камерах сгорания ракетных двигателей рабочий процесс сопровождается мощными пиками давления, внезапно появляющимися на номинальном режиме [1]. Как правило, это приводит к возбуждению высокочастотной неустойчивости. Другим примером является стук в двигателях внутреннего сгорания (ДВС), который, по-видимому, также обусловлен взрывными процессами [2]. Наконец, отметим вторичные ударные волны, иногда наблюдаемые в зоне реакции гетерогенной детонации, которые способствуют самоподдержанию инициирующего взрывного процесса и его распространению на большие расстояния [3].

Во всех перечисленных случаях взрывные явления возникают при некоторых критических значениях управляющих параметров процесса. Другими словами, система, устойчивая в некотором интервале значений управляющего параметра η , теряет устойчивость, когда η превышает критическое значение η_c . Улучшение характеристик распыла струйных смесительных элементов в камерах сгорания ракетных двигателей, понижение степени сжатия двигателей внутреннего сгорания, добавка промотора горения примеси в детонирующую смесь диспергированного горючего с газообразным окислителем, как правило, приводят к исчезновению вторичных взрывных явлений.

К числу отличительных свойств рассматриваемых процессов относится стохастичность, заключающаяся в том, что нельзя абсолютно точно предсказать временную эволюцию исследуемой многопараметрической системы при $\eta \sim \eta_c$. Это связано с большой чувствительностью исследуемых процессов к начальным условиям. Например, небольшое изменение гидродинамической обстановки в камере сгорания ДВС может привести к зарождению интенсивных ударных волн (УВ) при нормальном режиме работы. Поскольку горение даже хорошо перемешанной смеси всегда сопровождается шумом, то это означает, что акустические колебания и турбулентные флуктуации при $\eta \sim \eta_c$ могут быть причиной неустойчивой работы двигателя.

Существует несколько подходов к описанию нелинейной неустойчивости динамических процессов в камерах сгорания [4]. Классическая модель обратной связи процесса горения с возмущениями давления через время запаздывания химических реакций включает рассмотрение акустического поля в камере и не дает ответа на вопрос о причинах и механизме появления интенсивных ударных и детонационных волн. В [4] предложен механизм стука в ДВС, заключающийся в том, что при неравномерном распределении температуры в объеме цилиндра протекание химической реакции приводит к неравномерному расширению газа и, как следствие, — к появлению ударных и детонационных волн. Наиболее важен вывод [4] о том, что конечные возмущения давления в системе возникают из-за неоднородных начальных условий, т. е. без привлечения акустических эффектов.

В [5] для фотохимического инициирования предложен механизм возникновения детонации в реакционноспособной системе. Согласно [5], детонации всегда предшествуют один или несколько локальных микровзрывов, обусловленных самовоспламенением смеси в областях с малой задержкой самовоспламенения. Необходимым условием усиления образующихся возмущений давления является их синхронизация с энерго-

выделением за счет химических реакций. Такая синхронизация обеспечивается соответствующим пространственным градиентом задержки самовоспламенения в окрестности микровзрыва, который может быть создан различными способами.

При плоскосимметричной постановке задачи в [4, 6] градиент задержки воспламенения обеспечивался неравномерным начальным распределением температуры, в [5] — концентрацией свободных радикалов, в [7] — распределением предэкспонента. Во всех случаях в расчетах наблюдались характерное усиление УВ и выход на детонацию. Полученное расчетным путем время возникновения детонационной волны, как правило, соответствует нескольким десяткам времен химической реакции. Это свидетельствует о том, что для развития сильных возмущений давления в реакционном объеме достаточно наличие небольших пространственных неоднородностей параметров, влияющих на задержку самовоспламенения смеси. Кроме того, представляется возможным усиление УВ при наличии в окрестности микровзрыва градиента времени пребывания смеси при высокой локальной температуре. Большая чувствительность к начальным условиям, по-видимому, связана с сильной зависимостью задержки воспламенения от температуры. Вблизи предела самовоспламенения ситуация такова, что турбулентные флуктуации и акустические колебания могут действительно привести к раскачке колебаний и потере устойчивости рабочего процесса.

Появление областей с неравномерно нагретой и неравномерно перемешанной горючей смесью является неперенным спутником любых процессов сжигания гетерогенных смесей. Например, в [1] показаны реальные картины полей соотношения компонентов, создаваемые при работе струйных смесительных элементов. Температурные неоднородности, как правило, связаны с нестационарными процессами тепломассообмена и горения. Горению гомогенных смесей также могут сопутствовать температурные неоднородности и неравномерность состава смеси в различных точках камеры сгорания. Таким образом, представляется вероятным, что наличие в объеме локальных областей с неравномерными распределениями температуры или состава горючей смеси есть причина взрывных явлений в разнообразных энергетических системах. В связи с этим целесообразно выяснить закономерности возникновения конечных возмущений в области со сферически симметричным распределением задержки самовоспламенения реагирующей смеси. Представляют интерес и размеры неоднородностей, при которых в заданном объеме образуются сильные возмущения давления.

Рассмотрим камеру сгорания размером D , заполненную идеально газовой двухфракционной реагирующей смесью. Предположим, что в начальный момент времени газ покоится, давление P и относительная концентрация менее активного компонента a постоянны по всему объему камеры. Пусть в начальный момент времени в некоторой локальной области размером ε имеется неравномерное распределение температуры

$$T(0, x) = T_0 - \chi_T x$$

или относительной концентрации активного компонента b

$$b(0, x) = 1 - \chi_b x / \varepsilon, \quad b \geq 0.$$

Здесь x — эйлерова координата; χ_T — градиент температуры; $0 < \chi_b < 1$ — коэффициент; индекс 0 соответствует максимальному значению в момент времени $t = 0$. Эволюцию системы после воспламенения можно описать следующим образом:

$$\gamma \frac{\partial u}{\partial \tau} + (\xi/x)^{\nu-1} \frac{\partial p}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial \tau} = \ddot{u}, \quad \frac{\partial \xi}{\partial x} = \dot{v} (\ddot{x}/\xi)^{\nu-1}, \quad (1)$$

$$(\gamma - 1)^{-1} \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} + p \frac{\partial v}{\partial \tau} = \alpha_a a \exp[\beta_a (1 - \Theta^{-1})] + \alpha_b b \exp[\beta_a - \beta_b \Theta^{-1}],$$

$$\frac{\partial a}{\partial \tau} + a \exp[\beta_a (1 - \Theta^{-1})] = 0, \quad \frac{\partial b}{\partial \tau} + b \exp[\beta_a (1 - \beta_b \beta_a^{-1} \Theta^{-1})] \frac{k_b}{k_a} = 0.$$

Здесь p , v , u , Θ , ξ , x и τ — безразмерные давление, удельный объем, скорость, температура, эйлера и лагранжева координаты и время соответственно, определяемые из условий

$$p = P/P_0, \quad \Theta = T/T_0, \quad u = U/\sqrt{\gamma RT_0}, \quad v = VP_0/RT_0,$$

$$\tau = t k_a \exp(-E_a/RT_0), \quad \alpha_a = Q_a/RT_0, \quad \alpha_b = Q_b/RT_0,$$

$$\beta_a = E_a/RT_0, \quad \beta_b = E_b/RT_0, \quad \xi = x k_a \exp(-E_a/RT_0)/\sqrt{\gamma RT_0},$$

$$x = \left(\nu \int_0^{\xi} v^{-1} \xi^{\nu-1} d\xi \right)^{1/\nu},$$

где V , U — размерные удельный объем и скорость; R — газовая постоянная; Q — тепловой эффект реакции; E — энергия активации; k — предэкспоненциальный множитель; γ — показатель адиабаты; индексы a и b относятся к параметрам соответствующих компонентов смеси; $\nu = 1, 2, 3$ в плоском, цилиндрическом и сферическом случаях. Безразмерный градиент температуры

$$\lambda_T = \chi_T \sqrt{\gamma RT_0} \exp(E_a/RT_0)/k_a T_0.$$

Граничные условия: $u = 0$ на стенке или в центре при $\tau > 0$. Начальные условия:

$$\tau = 0: \quad p = 1, \quad v = 1 - \lambda_T \xi, \quad \Theta = v, \quad u = 0, \quad a = 1,$$

$$b = 1 - \chi_b \xi / \xi_0 \quad (2)$$

(ξ_0 — координата границы области ε).

Система уравнений (1) совместно с граничными и начальными условиями (2) решалась методом сквозного счета с введением искусственной вязкости [8]. Расчетный интервал содержал 200 точек по x . Для обеспечения устойчивости счета на шаг по времени накладывалось ограничение $\Delta \tau \leq \sqrt{\gamma p_{\max}} / 2\mu \Delta x$ (μ — коэффициент искусственной вязкости).

Для учета зависимости эволюции системы от типа симметрии области ε проведены расчеты образования, распространения и распада детонационного комплекса в смеси с неравномерным распределением температуры для плоского ($\nu = 1$) и сферического ($\nu = 3$) случаев при $\gamma = 1, 2$, $\mu = 1, 7$, $T_0 = 1500 \div 2000$ К, $b = 0$, $k_a = 10^9 \div 10^{11}$, $\alpha_a = 3 \div 6$, $\beta_a = 15 \div 20$, $\chi_T = 5 \cdot 10^3 \div 10^5$ К/м. Оказалось, что временная эволюция системы практически не зависит от параметра ν . Это связано с тем, что ударная волна появляется на конечном расстоянии от центра стенки, определяемом главным образом начальными условиями и значениями кинетических параметров смеси. Поскольку длина зоны индукции химической реакции за УВ очень мала, то дальнейшее распространение волны слабо зависит от геометрии задачи. Следовательно, все установленные ранее закономерности для плоского случая [4, 6] справедливы и для сферически симметричной области ε .

Для определения характерных размеров неоднородностей с градиентом задержки воспламенения, ведущих к образованию сильных возмущений давления в объеме, решалась задача о возникновении детонации при локально неоднородном распределении активного компонента b . Считалось, что в начальный момент времени $T = T_0$, постоянна по всему объему, т. е. $\chi_T = 0$. Величина T_0 выбиралась так, чтобы задержка самовоспламенения компонента a была велика. Самовоспламенение компо-

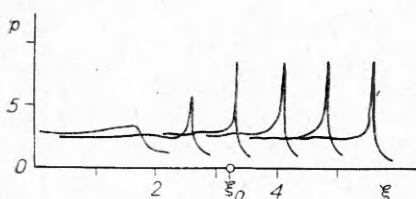


Рис. 1.

нента b приводило к появлению градиента температуры в объеме, что создавало условия для усиления возмущений давления [4, 6]. В зависимости от размера области ε с распределенным компонентом b , от кинетических параметров смеси и тепловых эффектов реакции в объеме D в расчетах реализовывались различные типы взрывных

процессов. Поскольку теплопроводность и диффузия здесь не учитывались, рассматривались времена, существенно меньшие характерных времен переноса. Расчеты проводились при следующих значениях определяющих параметров задачи: $\gamma = 1,2$, $\mu = 1 \div 3$, $T_0 = 800 \div 1400$ К, $k_a = -k_b = 10^{10}$, $\alpha_a = 5 \div 8$, $\alpha_b = 3 \div 5$, $\beta_a = 15 \div 20$, $\beta_b = 12 \div 15$, $\varepsilon = 2 \div 100$ мм. Отметим, что T_0 здесь ниже значений, используемых в [4, 6]. Такая температура характерна для камер сгорания и для УВ, ведущих детонацию в гетерогенных системах.

Первый тип взрывного процесса. При $\varepsilon \rightarrow D$ и $\chi_b \rightarrow 0$ в системе происходит тепловой взрыв — почти равномерный подъем давления по всему объему. При указанных значениях определяющих параметров давление в камере повышалось не более чем в 3 раза.

Второй тип взрывного процесса. При $\varepsilon_* < \varepsilon \leq D$ и $\chi_b = 1$ существует диапазон определяющих параметров, в котором наблюдалось возникновение детонации внутри области ε и дальнейшее стационарное распространение детонационной волны за пределами этой области, т. е. по смеси, содержащей только малоактивный компонент a . Временное развитие такого течения для смеси с параметрами $\beta_a = 16,7$, $\beta_b = 12,5$, $\alpha_a = 8$, $\alpha_b = 3$, $T_0 = 1000$ К показано на рис. 1, $\varepsilon_* = 50$ мм. Закономерности развития течения подобны рассмотренным в [6]. В частности, с увеличением ε выход на детонацию происходил дальше от центра. Давление за детонационной волной повышалось более чем в 8 раз по отношению к начальному.

Третий тип взрывного процесса. При $\varepsilon_{**} < \varepsilon < \varepsilon_*$ в некотором диапазоне определяющих параметров за пределами области ε формировалась детонационная волна, которая впоследствии распространялась стационарно по всему объему D . Временное развитие процесса можно описать в виде следующей последовательности сменяющих друг друга фаз течения:

- а) самовоспламенение компонента b и быстрое последующее воспламенение компонента a , находящегося внутри области ε ;
- б) выход волны давления на границу области ε ;
- в) затухание волны давления;
- г) самовоспламенение и повторный взрыв компонента a с образованием вторичной УВ в зоне за затухающей первичной волной;
- д) усиление вторичной УВ;
- е) выход вторичного комплекса в область невозмущенного течения, детонация.

Третий тип взрывного процесса характеризуется наличием предвестника, образующегося при микровзрыве смеси в области ε . Предвестник, распространяясь по однородной смеси, создает в ней условия для усиления вторичной волны. На рис. 2, а показана временная эволюция смеси с параметрами: $\beta_a = 16,7$, $\beta_b = 12,5$, $\alpha_a = 8$, $\alpha_b = 3$, $T_0 = 1200$ К, $\varepsilon = 5$ мм, $\Delta\tau_* = 0,27$, а на рис. 2, б — зависимости максимального давления в системе p_{\max} от времени τ . Из рис. 2, б следует, что с уменьшением $\varepsilon < \varepsilon_*$ при прочих равных условиях выход на детонацию осуществляется дальше от центра. Пульсации величины p_{\max} обусловлены продольной неустойчивостью одномерной ДВ.

Временной сдвиг момента зарождения ДВ с уменьшением ε связан с падением интенсивности первичной УВ, а следовательно, и начального подогрева смеси. При $\varepsilon = \varepsilon_{**} \approx 2$ мм и $D = 10$ см детонационная

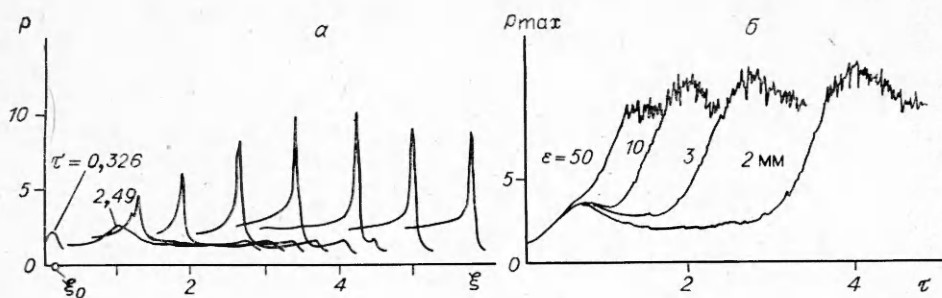


Рис. 2.

волна формировалась у стенки камеры. При $\epsilon < \epsilon_{**}$ в камере заданных размеров распространялась нестационарная взрывная волна. Повышение давления в такой волне больше, чем при равномерном протекании химической реакции во всем объеме (первый тип взрывного процесса). В пределе, когда $\epsilon \ll \epsilon_{**}$, в системе вновь наблюдался взрывной процесс первого типа.

К четвертому типу следует отнести колебательные взрывные процессы. Расчеты показали, что в некотором диапазоне определяющих параметров реализуется картина течения, показанная на рис. 3 ($\Delta\tau_* = 0,027$, $\beta_a = 19,8$, $\beta_b = 14,8$, $\alpha_a = 7,9$, $\alpha_b = 2,96$, $\epsilon = 50$ мм, $T_0 = 1010$ К). Характерная особенность таких процессов состоит в наличии фазы затухания взрывной волны. На рис. 3 представлен случай, когда в системе в результате сгорания активного компонента b возникали детонационные параметры и сразу же наступал срыв детонации, обусловленный относительно низкой температурой перед фронтом волны. Затухающая УВ играла роль предвестника (третий тип взрывного процесса) и создавала условия для усиления волны давления от вторичного взрыва (ВВ).

На рис. 4 представлены типичные зависимости максимального давления в системе от времени для взрывных процессов рассматриваемого типа (1 — пульсирующая детонация, реализующаяся в узком диапазоне определяющих параметров: $T_0 = 1013$ К, $\beta_a = 19,75$, $\beta_b = 14,8$, $\alpha_a = 7,9$, $\alpha_b = 2,96$; 2 — распад детонации ($T_0 = 1012$ К, $\beta_a = 19,8$, $\beta_b = 14,9$, $\alpha_a = 7,9$, $\alpha_b = 2,96$); 3 — затухание). Видно, что в объеме периодически зарождаются и затухают интенсивные ударные волны. Период колебаний зависел от ϵ и кинетических параметров задачи. В зависимости от условий расчета на стенку камеры приходила либо детонационная волна, либо серия ударных волн.

Специально исследовалась чувствительность описанных типов взрывных процессов к начальной температуре смеси. Повышение температуры от 1010 до 1020 К для смеси, эволюция которой показана на рис. 3, приводило к возникновению стационарной детонации типа той, которая показана на рис. 1. При $T_0 \approx 1015$ К картина течения сильно зависела от T_0 и даже от параметров схемы счета (например, коэффициента искусственной вязкости). Это свидетельствует о том, что в окрестности

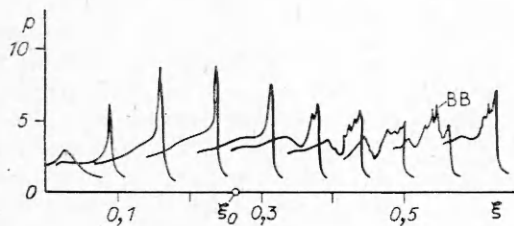


Рис. 3.

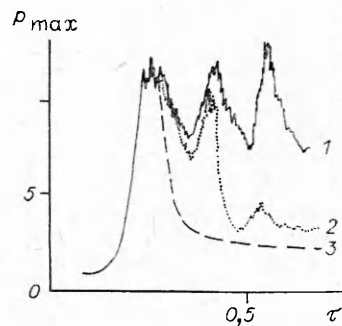


Рис. 4.

$T_0 \approx 1015$ К решение со взрывным процессом второго типа становится глобально неустойчивым. Подобные ситуации характерны для так называемых «синергетических» систем [9].

Таким образом, показано, что в неоднородных реакционноспособных системах при известных условиях могут возникать взрывные процессы. Малые геометрические размеры газофазных неоднородностей, требуемые для образования достаточно сильных волн давления в объемах, указывают на то, что механизм рождения нелинейных возмущений как в гомогенных, так и в гетерогенных смесях, по-видимому, обусловлен схемой, предложенной в [4].

Капли горючего могут повлиять на распространение взрывной волны, поскольку в окрестности капель, как правило, имеются градиенты температуры и концентрации газофазной смеси. Для дальнейшего развития модели необходимо рассмотреть закономерности образования и распространения конечных возмущений давления в условиях распределенных неоднородностей температуры и состава смеси. Однако следует иметь в виду, что одномерное распространение детонационной волны неустойчиво и сопровождается пульсациями параметров (см. рис. 3, 4). В проведенных расчетах рассматривалась изолированная неоднородность температуры и концентрации, поэтому выделение перечисленных выше типов взрывных процессов на фоне таких пульсаций не представляло трудностей. На этапе взаимодействия волн давления и реакции пульсации усиливались, а при их рассогласовании ослабевали.

ЛИТЕРАТУРА

1. Харрье Д. Т., Рирдон Ф. Г. Неустойчивость горения в ЖРД.— М.: Мир, 1975.
2. Лернер М. О. Химические регуляторы горения моторных топлив.— М.: Химия, 1979.
3. Ragland K. W., Dabora E. K., Nicholls J. A. Phys. Fluids, 1968, 11, 11, 2377.
4. Зельдович Я. Б., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М. и др. ПМТФ, 1970, 2, 76.
5. Lee J. H., Knystautas R., Yoshikawa N. Acta Astronautica, 1978, 5, 971.
6. Гельфанд Б. Е., Поленов А. Н., Фролов С. М. и др. ФГВ, 1985, 21, 4, 118.
7. Barthel H. O., Strehlow R. A. AIAA Paper N 79-0286, 1979.
8. Рихтмайер Р., Мортон К. Разностные методы решения краевых задач.— М.: Мир, 1972.
9. Гленедорф Г., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций.— М.: Мир, 1973.

Поступила в редакцию 26/IV 1988

О ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ПРОЧНОСТИ КРИСТАЛЛА В УСЛОВИЯХ УДАРНО-ВОЛНОВОГО НАГРУЖЕНИЯ

М. А. Могилевский, И. О. Мынкин

(Новосибирск)

Уровень касательных напряжений на фронте плоской стационарной ударной волны (УВ) может быть оценен методом Кована из адиабаты Гюгонио [1]. В диапазоне давлений УВ в несколько десятков гигапаскалей касательные напряжения во много раз превышают предел текучести в нормальных условиях деформирования. Согласно оценке [1], в меди уровень касательных напряжений на фронте УВ 26 ГПа превышает теоретическую прочность, что дает основание предложить модели «сверхкритического сдвига» [1] и другие специфические механизмы пластической деформации при ударно-волновом нагружении (дислокационная стенка Смита [2], схема Майерса [3] и др.). Однако структурные исследования [2, 4, 5] монокристаллов меди и других металлов, подвергнутых ударно-волновому нагружению в диапазоне давлений до 60—80 ГПа, не выявили признаков реализации «сверхкритического сдвига». При численном моделировании поведения холодной бездефектной кристаллической решетки в условиях сильного одномерного сжатия, характерного для де-