

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСШИРЯЮЩЕЙСЯ МНОГОФРОНТОВОЙ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ

А. А. Васильев, А. В. Троцюк*

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

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

Представлены результаты экспериментальных исследований расширяющейся многофронтной детонационной волны, в которых обнаружены две стадии спонтанного образования новых возмущений и поперечных волн на расширяющемся фронте детонационной волны. Обсуждены основные механизмы реинициирования детонационных волн. Проведено двумерное численное моделирование динамики многофронтной детонационной волны в линейно расширяющемся канале. Эффект спонтанного образования новых возмущений и новых поперечных волн подтвержден расчетами, причем основным механизмом размножения поперечных волн является неустойчивость участков фронта детонационной волны при их выходе из пересжатого состояния и ослаблении при своем расширении.

Ключевые слова: ячейка, детонация, моделирование, самоорганизующиеся структуры.

ВВЕДЕНИЕ

Возникновение и разрушение упорядоченных газодинамических структур в химически активной среде — одна из важнейших проблем теории динамических систем. Примером такой системы является многофронтная детонационная волна (ДВ), стационарно распространяющаяся по реагирующей газовой смеси. Сложная трехмерная и нестационарная структура фронта такой волны при распространении в каналах постоянного сечения характеризуется в то же время определенной упорядоченностью, геометрическим параметром которой является размер элементарной ячейки ДВ.

В стационарно расширяющихся ДВ также наблюдается многофронтная ячеистая структура, т. е. упорядоченная структура ДВ типична для волн любой симметрии — от плоской до сферической. Более того, экспериментально установлено (например, [1]), что в расширяющихся ДВ размер ячейки практически не меняется по мере увеличения радиуса волны. Следует особо подчеркнуть нетривиальность подобной самоорганизации и периодичности для расходящихся волн, поскольку это требует, как минимум, согласованного возникновения новых поперечных волн при возраста-

нии радиуса волны, обеспечивающих постоянство характерного размера структуры ДВ.

Несмотря на значительные успехи в исследованиях локальных и интегральных характеристик многофронтной детонации при ее распространении в каналах постоянного сечения, применительно к расширяющимся волнам остаются невыясненными многие физические аспекты и механизмы нестационарного взаимодействия элементов детонационного фронта. Это обусловлено как объективными трудностями экспериментального исследования характеристик трехмерного пульсирующего фронта волны, так и сложностью трехмерного математического моделирования многофронтной детонации.

Элементы расходящихся волн являются основой многих газодинамических процессов, сопровождаемых химическими реакциями (например, турбулентное горение, переход горения в детонацию, дифракция ДВ и т. д.), потому задача исследования физических механизмов возникновения и самоорганизации упорядоченной структуры фронта ДВ при ее постоянном расширении является актуальной. Комплексное (экспериментальное и численное) исследование должно прояснить не только физическую природу возникновения и самосогласования структуры расширяющегося детонационного фронта, но и выявить ряд особенностей течений со сложной структурой газодинамиче-

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 00-01-00817а).

ских разрывов, важных с точки зрения как теории, так и практических приложений.

ЭКСПЕРИМЕНТ И ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Для решения поставленной задачи внимание на первом этапе было сосредоточено на более простом случае расходящихся ДВ, обладающих только цилиндрической симметрией. Такие волны возникают при инициировании смеси линейным источником в вершине секторного или в центре цилиндрического каналов постоянной толщины, при переходе ДВ из канала постоянного сечения в расширяющийся по линейной образующей (дифракция ДВ) и т. д. При экспериментальном исследовании процесса инициирования должна полностью проявиться динамика возникновения и последующей трансформации ячеистой структуры расширяющейся ДВ, а в «более простом» случае исследования дифракции трансформации подвергается уже предварительно упорядоченная самосогласованная структура.

Эксперименты по инициированию ДВ проводились в плоском канале толщиной 10 (или 5) мм, образованном двумя близко расположенными параллельными пластинами. Взрывающаяся проволока толщиной 50 мкм в центре канала использовалась как инициатор при разряде через управляемый тиратрон ТГИЗ-325/16 конденсатора емкостью $C = 1$ мкФ, заряженного до напряжения $U_0 = 10$ кВ (ось инициатора параллельна оси канала).

Эксперименты по дифракции и трансформированию структуры многофронтной детонации при ее переходе из канала постоянной ширины l в расширяющийся канал (угол расширения α) проводились в плоских каналах постоянной высоты h при варьировании ширины, высоты и угла расширения канала, состава смеси, начального давления. Результаты предыдущих исследований о влиянии этих параметров на интегральные характеристики дифрагирующей ДВ изложены, например, в [1–3]. В данной же статье представлены результаты, касающиеся физических механизмов возникновения новых поперечных волн в расширяющейся волне и последующей динамики их самосогласования с уже существующими поперечными волнами.

Исследовались околоскритические режимы, когда тщательный контроль за всеми параметрами смеси и инициатора позволяет зафиксировать наиболее четко эффекты спонтанного

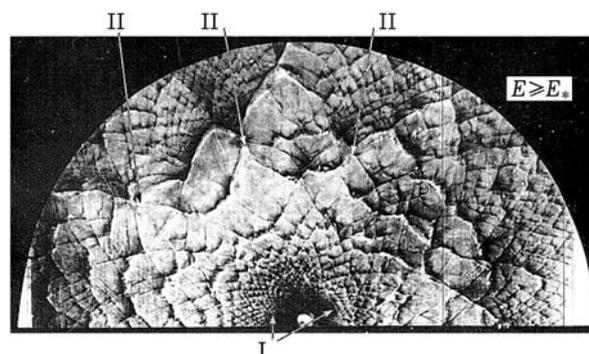


Рис. 1. Следовой отпечаток критического режима детонации в смеси $C_2H_2 + 2,5O_2$

зарождения неустойчивости расширяющегося фронта ДВ. При проведении экспериментов использовалось двухэтапное вакуумирование: на первом этапе из рабочей камеры откачиваются продукты предыдущего взрыва (до давления порядка 15 Па) и камера наполняется смесью до давления, равного примерно половине рабочего, без инициирования процесса; на втором этапе камера с напущенной смесью вновь откачивается (до давления порядка 10 Па) и вторично заполняется смесью уже до рабочего давления. После этого проводятся инициирование смеси и регистрация процесса.

На рис. 1 приведен следовой отпечаток критического режима инициирования цилиндрической детонации с помощью взрывающейся проволоки в смеси $C_2H_2 + 2,5O_2$.

При критическом инициировании четко фиксируются две стадии спонтанного возникновения ячеистой структуры ДВ: вблизи инициатора (стрелки I на рис. 1) и на некотором удалении от него (стрелки II), после того как скорость инициирующей волны опускается ниже скорости самоподдерживающейся детонации и в зависимости от вложенной в смесь энергии процесс либо затухает, либо трансформируется в расходящуюся многофронтную ДВ [1, 4]. Рис. 2 иллюстрирует динамику размножения количества ячеек $N = 2\pi r/a$ на фронте волны в зависимости от радиуса фронта r/b (a и b — поперечный и продольный размеры ячейки).

Первая стадия (область I на рис. 2) фиксируется вблизи инициатора. Она связана с развитием неустойчивости газодинамического комплекса из ударной волны и зоны химической реакции (см., например, [5]) при ослаб-

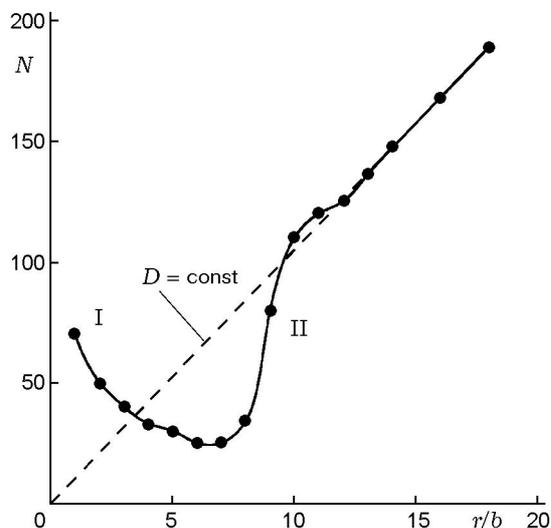


Рис. 2. Динамика размножения ячеек на расширяющемся фронте волны

лении сильно пересжатой ($D > 2D_0$, D_0 — скорость Чепмена — Жуге) взрывной волны и увеличении роли химического энерговыделения смеси по мере удаления от источника. Начиная с некоторого радиуса за первоначально гладкой волной спонтанно возникает большое количество возмущений. Вследствие этого возникает мелкомасштабная ячеистая структура следовых отпечатков с первоначальным размером ячейки на уровне разрешающей способности следовой методики и в десятки раз меньше размера ячейки в самоподдерживающейся ДВ. При удалении от области I с увеличением радиуса в зоне нестационарного затухания ДВ ячейки укрупняются, новые возмущения практически не возникают и даже наблюдается некоторое сокращение количества поперечных волн (см. рис. 2) на поверхности расширяющейся ДВ за счет затухания слабоинтенсивных возмущений.

Вторая стадия (стрелки II на рис. 1 и область II на рис. 2) спонтанного увеличения количества поперечных волн на расширяющемся фронте волны фиксируется тогда, когда режим затухания волны начинает трансформироваться в режим самоподдерживающейся детонации. На этой стадии новые поперечные волны рождаются почти одновременно в нескольких точках расширяющегося фронта ДВ (стрелки II на рис. 1).

Трансформация затухающей волны в самоподдерживающуюся ДВ наблюдается при

значении поглощенной смесью энергии инициатора, большем (или равном) критической энергии иницирования этой смеси при данных начальных условиях. При энергии, меньшей критического значения, волна продолжает затухать и вторая стадия размножения поперечных волн не фиксируется. При этом ячейки, зародившиеся на первой стадии, за счет затухания скорости волны укрупняются настолько, что их размер во много раз превышает размер ячейки в самоподдерживающейся ДВ, и ячеистая структура отпечатков постепенно исчезает.

Стационарность распространения ДВ в химически активной смеси обусловлена самоогласованностью газодинамических процессов с процессом химического энерговыделения смеси. При нарушении такой согласованности волна переходит на нестационарный режим, а упорядоченная структура исходного масштаба в зависимости от начальных или граничных условий либо трансформируется в новую структуру (с масштабом, соответствующим новому режиму самосогласования газодинамики и энерговыделения), либо полностью разрушается. В расширяющейся волне основная роль в нарушении самосогласованности принадлежит радиальной волне разрежения, постоянно меняющей градиенты всех газодинамических параметров на фронте ДВ. Воздействие волн разрежения замедляет скорости химических реакций за ослабленными элементами фронта и тем самым снижает эффективную скорость химического энерговыделения смеси.

Среди механизмов, способствующих восстановлению упорядоченной структуры, можно выделить следующие:

- развитие неустойчивости газодинамического комплекса из ударной волны и фронта химической реакции, разделенных зоной индукции (см., например, [5]);

- классическое адиабатическое самовоспламенение смеси после истечения периода индукции τ_{ind} ;

- реиницирование смеси в местах возникновения «горячих точек» (см., например, [6]), т. е. локальных областей несгоревшего газа, в которых в результате различных газодинамических процессов (например, при столкновениях ослабленных возмущений) температура газа оказалась выше, чем в остальном непрореагировавшем газе;

- реиницирование за счет проникнове-

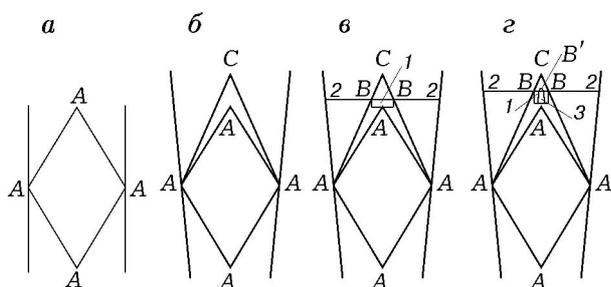


Рис. 3. Идеализованная схема возникновения и развития микроочагов иницирования в зоне индукции

ния струй горячих продуктов в исходную смесь (см., например, [7]) ;

— реиницирование «смешением» горячих продуктов реакции с непрореагировавшей смесью на границах их контакта (см., например, [8]);

— иницирование смеси по градиентному механизму (см., например, [9]) — на неоднородностях температуры, плотности или задержек воспламенения (SWASER-механизм по зарубежной терминологии, см., например, [10]) и т. д.

Для расширяющихся волн зона формирования самоподдерживающейся ДВ характеризуется радиусом формирования r_{form} (см., например, [4]). Описанные выше две стадии спонтанного размножения ячеек фиксируются в области $r < r_{form}$. На расстояниях $r > r_{form}$ эффекты спонтанного размножения ячеек не регистрируются. Коэффициент размножения ячеек на расширяющемся фронте, определяемый формулой $\chi = 2\pi(r + b)/2\pi r = 1 + b/r$, при $r > r_{form}$ монотонно уменьшается и не превышает величины среднестатистического разброса $\Delta a/a$ (из-за нерегулярности ячеистой структуры).

Возможная причина появления новых возмущений при $r > r_{form}$ — возникновение и развитие микроочагов иницирования в зоне индукции. Идеализованная схема подобного процесса внутри отдельной ячейки представлена на рис. 3. Буквой *A* отмечены области соударений поперечных волн для случая, когда ДВ распространяется в канале постоянного сечения (рис. 3,а), буквой *C* — области, где должны произойти соударения тех же поперечных волн в расширяющемся канале (рис. 3,б–г), очевидно — сдвинутые по ходу распространения ДВ.

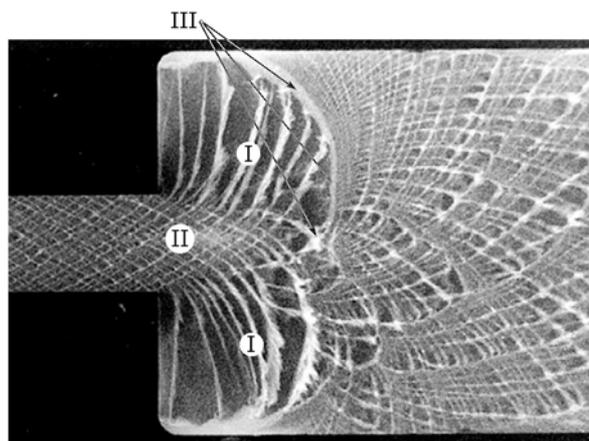


Рис. 4. Фотография самосвечения ДВ при переходе из узкой секции плоского канала в широкую для случая околокритического реиницирования ДВ

Точки *B* на рис. 3,в — тройные точки контакта поперечной волны с головным фронтом (участки 2) расширяющейся ДВ, 1 — зона индукции за расширяющейся волной. Цифрой 3 на рис. 3,г отмечен новый микроочаг иницирования, возникший в глубине зоны индукции вблизи фронта горения; взрывная волна от такого нового микроочага, достигнув головного фронта, приводит к возникновению на нем новых тройных точек *B'*, движущихся по фронту в противоположных направлениях от микроочага. Траектории движения точек *B'* представляют новую пару расходящихся линий, которые являются началом новой ячейки в расширяющейся волне. При этом точки *B* продолжают дочерчивать контур исходной ячейки. Более того, столкновения изломов *B'* фронта ДВ со «старыми» изломами *B* (движущимися навстречу друг другу) являются дополнительными своеобразными микроцентрами реиницирования и зарождения новых возмущений на фронте расширяющейся ДВ. И лишь в случае, когда не возникнет ни одного нового микроочага, классическое соударение поперечных волн в точке *C* восстановит ячеистую структуру фронта расширяющейся ДВ. Физические механизмы появления нового микроочага реиницирования перечислены выше.

На рис. 4 приведена фотография самосвечения ДВ при ее переходе из узкой секции плоского канала в широкую (дифракция на прямом угле) для случая околокритического реиници-

рования ДВ (плоский канал постоянной глубины, смесь $C_2H_2 + 2,5O_2$, методика двойного вакуумирования, инициатор — мощный электрический разряд в начале узкой секции). Светящиеся линии, образующие ячеистую структуру, являются траекториями поперечных волн, распространяющихся по фронту ДВ. Ячеистая структура служит индикатором детонационного характера распространения волны. Отсутствие ячеистой структуры однозначно свидетельствует о срыве детонационного режима и переходе к режиму высокоскоростного турбулентного горения. На фотографии четко видно, что начиная со среза канала поперечные волны, выходящие из центральной зоны канала, не испытывают встречных столкновений (отсутствие ячеистой структуры, зоны I на рис. 4). Это свидетельствует о том, что боковые волны разрежения последовательно срывают детонационный режим дифрагирующей волны (с флангов по направлению к оси), сохраняя его в центральной части канала (зона II) до тех пор, пока фронты встречных волн разрежения не достигнут оси канала. В этот момент детонационный характер дифрагирующей волны полностью сорван, а сама волна представляет собой квазицилиндрический ударный фронт и квазиэллиптический фронт горения, между которыми формируются расширяющиеся от оси симметрии зоны индукции. При докритических размерах узкого канала после этого момента эффектов спонтанного зарождения новых возмущений не фиксируется, волна затухает и перестраивается на режим турбулентного горения. При критических (и сверхкритических) размерах канала сокращение центральной зоны II сменяется спонтанным зарождением новых возмущений и последующим реиницированием расходящейся ДВ (см., например, [1, 2, 6, 11, 12]).

В экспериментах выявлено два механизма реиницирования расходящейся ДВ.

Первый — возникновение в зоне индукции дифрагирующей волны квазисамоподдерживающейся ДВ, распространяющейся по слою ударно-сжатого газа в направлении от оси канала (зона III на рис. 4). В зоне индукции эта волна характеризуется гораздо меньшим масштабом ячеистой структуры по сравнению с нормальным размером ячейки в ДВ, распространяющейся по исходной смеси. Такая расходящаяся от оси ДВ с мелкоячеистой структурой будет взаимодействовать с головным удар-

ным фронтом дифрагирующей волны с образованием пересжатого, постепенно ослабевающего косоугольного фронта детонации. При этом выходящие из зоны индукции на фронт поперечные волны с «тонкой» (мелкоячеистой) структурой будут преломляться в исходную смесь и создавать эффект спонтанного зарождения новых поперечных волн на расширяющемся фронте. Из «тонкой» структуры при последующем расширении волны сформируется укрупненная ячеистая структура, свойственная исходной смеси.

Второй механизм — зарождение на флангах дифрагирующего фронта новых, но не самоподдерживающихся детонационных, поперечных волн, движущихся к центру, с последующим их столкновением в ударно-сжатой зоне индукции в слое над вершиной исчезнувшего детонационного конуса. Такие поперечные волны появляются либо в результате возникновения и развития очагов самовоспламенения (стимулированного волновыми возмущениями), либо при взаимодействии встречных поперечных волн при их затухающем распространении от оси с данным очагом воспламенения или с другими неоднородностями. Возможен также сценарий реиницирования, когда новая поперечная волна с фланга столкнется с одной из последних поперечных волн первоначального семейства.

Анализ типичных очагов реиницирования (например, на рис. 1 и 4) свидетельствует, что чаще всего реиницирование при дифракции и на второй стадии критического режима инициирования расходящихся ДВ происходит в результате взаимодействия различных возмущений (естественной или искусственной природы). Новые очаги возникают в расширяющейся волне в глубине зоны индукции вблизи границы сжатого несгоревшего газа и продуктов реакции. В ослабленных расширением волнах «тонкая» структура ДВ, распространяющейся по зоне индукции, является основным источником новых ячеек в расширяющемся фронте. Следует отметить, что в нестационарных условиях перечисленные выше индивидуальные механизмы реиницирования, как правило, проявляются коллективно, причем для расходящейся волны адиабатическое самовоспламенение в чистом виде наблюдается значительно реже.

Критические режимы восстановления упорядоченной структуры ДВ зависят от обоих

размеров канала: ширины l и высоты h . Этот результат отличается от бытовавшего (во всяком случае, на начальном этапе исследований дифракции ДВ) мнения о наличии только одного критериального параметра реинициирования цилиндрической детонации $l_{**}/a = 10$ и его постоянстве для различных смесей и условий эксперимента (см., например, [11, 12]). Здесь l_{**} — критическая ширина дифракционного канала, когда при фиксированных геометрии, составе смеси, температуре, давлении равновероятно наблюдаются и срыв, и реинициирование дифрагирующей ДВ. На самом деле, влияние высоты h становится незначительным лишь при $h/l \geq 1$. При уменьшении h/l параметр l_{**}/a увеличивается, и особенно заметно при $h < a$. Увеличение l_{**}/a вплоть до значения 45 зафиксировано и при большом разбавлении смеси аргоном (см., например, [1]).

Совокупность экспериментальных данных по цилиндрической и сферической дифракции позволила уточнить соотношение между критическими параметрами инициирования для этих случаев симметрии, которое включено в компьютерную программу «Безопасность», разрабатываемую в ИГиЛ СО РАН для оценок детонационной и экологической опасности горючих систем (см., например, [13]).

МОДЕЛИРОВАНИЕ

Двумерное моделирование структуры ДВ в канале постоянного сечения достигло того уровня, когда достаточно надежно можно рассчитать основные параметры ячейки ДВ [14, 15]. Появились расчетные работы по двумерному моделированию перехода ДВ из одного канала постоянного сечения в другой соосный канал большего (но тоже постоянного) сечения при скачкообразном изменении одного из размеров канала (см., например, [16–19]), где расширяющаяся ДВ возникает как переходный элемент дифракции (затем течение вновь соответствует каналу постоянного сечения). Однако вопросы возникновения и самосогласования структуры на стадии расширения волны в этих работах вообще не рассматриваются.

Результаты начального этапа наших исследований по расширяющимся ДВ были представлены на 18-м Международном коллоквиуме ICEDERS [20]. Там же был представлен доклад [21], в котором независимо были выполнены расчеты поведения ДВ в канале с малым

углом расширения (3 и 5°) и получено, что размер ячейки в расширяющейся волне увеличивается по сравнению с каналом постоянного сечения. Однако уменьшения или тем более увеличения количества возмущений на расширяющемся фронте обнаружено не было ввиду малого расширения канала и малого удаления от точки инициирования.

ПОСТАНОВКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ

Модельная двумерная задача сформулирована для случая перехода многофронтной ДВ из секции формирования ДВ постоянной ширины в линейно расширяющуюся секцию канала, обе секции канала имеют постоянную глубину. Начало координат совмещено с левым нижним углом секции формирования, горизонтальная ось x направлена вдоль нижней стенки канала в направлении распространения ДВ, ось y — вверх, по ширине (высоте) канала — $l \equiv H$. На расстоянии $x = x_*$ от начала координат нижняя стенка канала имеет излом: канал с первоначальной шириной (высотой) в одну детонационную ячейку $H = a_0$ линейно расширяется с углом раствора $\alpha = 10^\circ$. Для анализа выбрана смесь $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ при начальных давлении $p_0 = 0,2$ бар и температуре $T_0 = 298$ К, расчетный размер ячейки $a_0 = 0,62$ см для рабочего варианта расчета, и он совпадает с величиной a в расчете с более мелкой сеткой. Расширение канала начинается с координаты $x_* = 11,265$ см: к этому моменту в секции постоянной ширины полностью завершено формирование упорядоченной детонационной ячейки; в данном сечении поперечные волны сталкиваются на середине ($y = a_0/2$) секции формирования ДВ.

СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ

Используются следующие обозначения: ρ — плотность; u и v — компоненты скорости вдоль осей x и y соответственно; E и U — полная и внутренняя энергия на единицу массы; E_d — средняя энергия диссоциации продуктов реакции; μ — средняя молекулярная масса смеси; μ_a , μ_{\min} , μ_{\max} — молярные массы смеси в атомарном, предельно диссоциированном и предельно рекомбинированном состояниях соответственно; Y — параметр, характеризующий долю периода индукции до старта химической реакции: $Y = 1$ в начале зоны индукции

и $Y = 0$ в конце ее; p — давление, T — температура, R — газовая постоянная, a и b — поперечный и продольный размеры детонационной ячейки; индекс 0 характеризует начальное состояние.

Динамика сжимаемой химически реагирующей среды описывается двумерными уравнениями Эйлера:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{q})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}(\mathbf{q})}{\partial y} = \mathbf{W}, \quad (1)$$

где

$$\mathbf{q} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho E, \rho \mu, \rho Y)^T,$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{q}) = (\rho u, p + \rho u^2, \rho uv, u(p + \rho E), \rho u \mu, \rho u Y)^T,$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{q}) = (\rho v, \rho uv, p + \rho v^2, v(p + \rho E), \rho v \mu, \rho v Y)^T,$$

$$\mathbf{W} = (0, 0, 0, 0, \rho W_\mu, \rho W_Y)^T,$$

$$E = U + (u^2 + v^2)/2.$$

Здесь W_μ и W_Y — скорости изменения μ и Y соответственно; верхним индексом «т» обозначено транспонирование.

Химическое превращение вещества описывалось в рамках двухстадийной модели кинетики (индукционная стадия и стадия химического превращения) [22]: при $1 \geq Y > 0$ полагается

$$W_Y = 1/\tau_{ind}, \quad W_\mu = 0,$$

$$U = \frac{1}{\gamma_0 - 1} \frac{p}{\rho} + E_d \left(\frac{1}{\mu_0} - \frac{1}{\mu_{\min}} \right), \quad (2)$$

при $Y = 0$ —

$$W_Y = 0, \quad W_\mu = W_\mu(T, \mu, \rho), \quad U = U(T, \mu). \quad (3)$$

Для индукционной стадии ($1 \geq Y > 0$) использована аппроксимирующая экспериментальные данные формула для времени индукции из [23]:

$$\tau_{ind} = 4,17 \cdot 10^{-14} \cdot \exp \frac{18100}{RT} \times \\ \times [\text{O}_2]^{-1/2} [\text{H}_2]^{-1/2} \left[\frac{\text{МОЛЬ} \cdot \text{С}}{\text{СМ}^3} \right].$$

После истечения периода индукции ($Y = 0$) этап энерговыделения в зоне реакции описывался согласно модели [24, 25]:

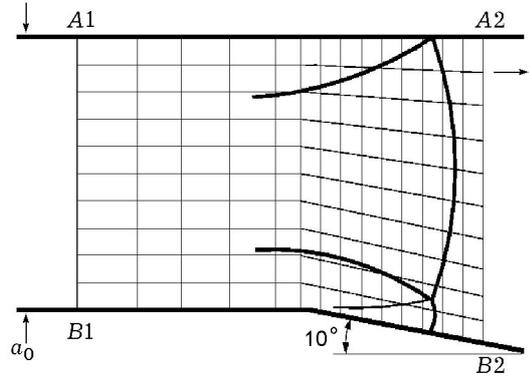


Рис. 5. Вычислительная область и граничные условия:

на границах $A1-A2$ и $B1-B2$ — условие непротекания, на границе $A1-B1$ — условие сверхзвукового истечения газа, на границе $A2-B2$ — невозмущенное начальное состояние газа: смесь $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ при $p_0 = 0,2$ бар и $T_0 = 298,15$ К

$$W_\mu(T, \mu, \rho) = 4K + \rho^2 / \mu (1 - \mu / \mu_{\max})^2 - \\ - A_2 T^{3/4} \rho [1 - \exp(-\theta/T)]^{3/2} \times \\ \times [\exp(-E_d/RT)] (\mu / \mu_{\min} - 1)$$

совместно с калорическим уравнением состояния [25]

$$U(T, \mu) = E_d \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{\min}} \right) + \left(\frac{3}{4} \left(\frac{\mu}{\mu_a} + 1 \right) + \right. \\ \left. + \frac{3}{2} \left(\frac{\mu}{\mu_a} - 1 \right) \frac{\theta/T}{\exp(\theta/T) - 1} \right) \frac{RT}{\mu}, \quad (4)$$

согласованным с выбранным кинетическим уравнением с учетом второго начала термодинамики.

Система определяющих уравнений замыкалась термическим уравнением состояния идеального газа

$$p/\rho = RT/\mu. \quad (5)$$

На верхней и нижней стенках канала ставились условия непротекания, а на левой границе — условие сверхзвукового истечения газа (рис. 5). При реализации данных граничных условий в вычислительной программе применялись приемы, описанные в [26]. На правой границе задавалось условие невозмущенного начального состояния газа $\mathbf{q} = \mathbf{q}_0$, где

$$\mathbf{q}_0 = (\rho_0, 0, 0, \rho_0 E_0, \rho_0 \mu_0, \rho_0)^T.$$

В расчетах использованы следующие значения констант (согласно [24, 27, 28]): $E_d =$

459208,9 Дж/моль, $\mu_{\min} = \mu_a = 6,005$ г/моль, $\mu_{\max} = 18,016$ г/моль, $\mu_0 = 12,011$ г/моль, $A_2 = 4,646561 \cdot 10^{10}$ м³/(кмоль·с·К^{3/4}), $K_+ = 6 \cdot 10^8$ м⁶/(кмоль²·с), $\theta = 4000$ К, $\gamma_0 = 1,397$.

МЕТОД РЕШЕНИЯ

Система уравнений (1) совместно с соотношениями (2)–(5) является гиперболической системой уравнений законов сохранения с релаксационным источниковым членом W , моделирующим термохимические превращения. При численном решении системы использовалась адаптивная подвижная структурированная многозонная сетка (см. рис. 5).

По оси x строилась подвижная сетка с общим числом ячеек $N_x = 350$, из них $N_{x,1} = 300$ ячеек образовывали равномерную сетку с размером ячейки h_x . Равномерная сетка охватывала область течения с большими градиентами параметров в окрестности ведущего ударного фронта ДВ и перемещалась вместе с ним. Оставшиеся $N_{x,2} = N_x - N_{x,1}$ ячеек образовывали неравномерную сетку, которая занимала область от начала счетной области до начала равномерной сетки; т. е. расчетная область по оси x распространялась на часть дистанции, пройденную ДВ от начала канала. В ходе предварительных численных экспериментов по двумерному моделированию структуры ДВ в канале постоянной ширины (высоты) общая длина L_x счетной области по x была выбрана такой, чтобы всегда обеспечивалось условие сверхзвукового вытекания потока газа через левую границу счетной области в любой момент времени при любом значении y (это условие проверялось на каждом шаге по времени в каждой левой ячейке по всей высоте канала).

По оси y в секции формирования ДВ использовалась равномерная сетка с общим числом ячеек N_y и размером счетной ячейки $h_y = a_0/N_y$. При выходе ДВ в расширяющуюся секцию в каждом сечении канала (т. е. при каждом значении x) по оси y применялась равномерная сетка с увеличивающимся размером счетной ячейки до тех пор, пока не достигался пороговый размер $h_{y*} = 2h_y$, после чего число счетных ячеек N_y удваивалась (уменьшение вдвое размера ячейки по y). Подобная процедура деления расчетных ячеек осуществлялась периодически каждый раз при превышении размером счетной ячейки пороговой величины h_{y*} . Первоначально $h_y = h_x$ и $N_y = 200$.

Такой подход позволил уменьшить общее число счетных ячеек и снизить требования к объему оперативной памяти компьютера с одновременным сохранением высокого пространственного разрешения в рассматриваемой области течения.

Численное решение системы уравнений (1) на описанной выше двумерной сетке находилось с использованием конечно-объемных схем MUSCL TVD. Расчет исходных величин для решения задачи Римана на гранях контрольного объема по оси x в зоне с равномерной сеткой осуществлялся схемой 4-го порядка точности [29, 30], а в зоне с неравномерной сеткой — модифицированной для таких сеток согласно [31] схемой 3-го порядка [32]. По оси y величины вычислялись с использованием схемы 4-го порядка точности [29, 30].

В данной работе использовался новый современный алгоритм приближенного решения задачи Римана — solver HLLC [33]. Данный алгоритм является быстрым (безытерационным) высокоточным инструментом для определения потоков через грани контрольного объема в схемах типа MUSCL. При реализации этого алгоритма для решения задачи Римана в случае химически реагирующего газа был использован «метод релаксации энергии», предложенный в [34]. Данный метод снимает проблему численного решения распада произвольного разрыва для среды со сложным нелинейным уравнением состояния (в том числе с переменным показателем адиабаты).

Интегрирование по времени системы уравнений осуществлялось явным методом Эйлера. Шаг по времени определялся на каждом временном слое исходя из условия устойчивости [26], число Куранта при этом составляло 0,2.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Результаты моделирования показаны на рис. 6, где приведена численная шпирен-визуализация течения. Выбор именно этого параметра для изображения структуры волны обусловлен его преимуществом по сравнению с другими (например, давлением). При изображении поля градиента плотности четко фиксируются все особенности течения. Изменения плотности четко показывает не только форму ведущего ударного фронта ДВ и структуру поперечных волн, но и контактные разрывы. Значительные изменения плотности в конце периода индукции (начале стадии тепловыделения)

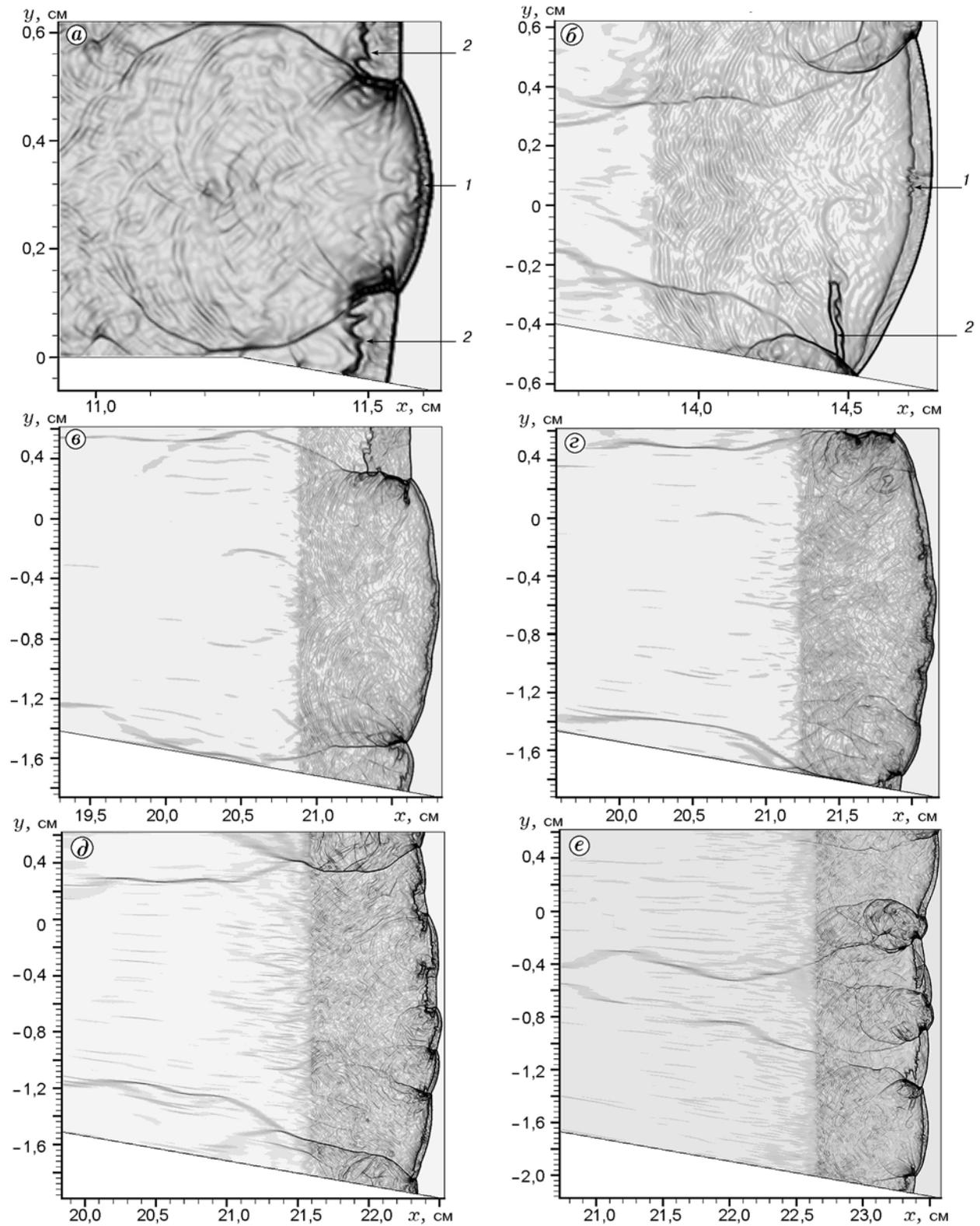


Рис. 6. Численная шпирен-визуализация структуры ДВ, распространяющейся в смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ при $p_0 = 0,2$ бар в линейно расширяющемся канале:

$\alpha = 10^\circ$; а — фронт волны достиг ширины канала $H = 1,1a_0$, $a_0 = 0,62$ см; б — $H = 2a_0$; в — $H = 4a_0$; г — $H = 4,1a_0$; д — $H = 4,2a_0$; е — $H = 4,5a_0$; ж — $H = 5,5a_0$

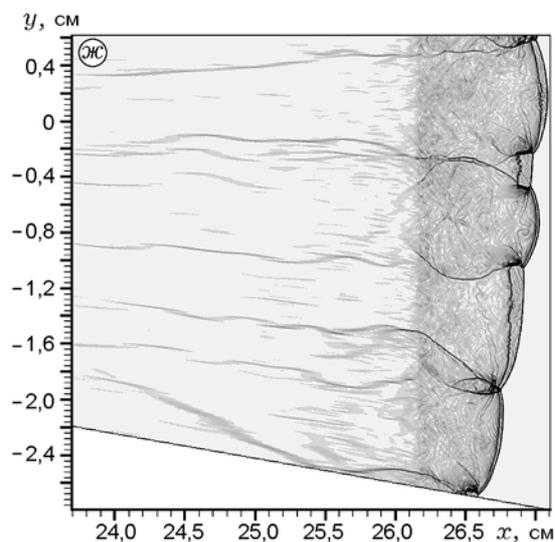


Рис. 6. Продолжение

отчетливо показывают двумерную структуру зоны индукции ДВ.

На рис. 6, *a* изображен фронт ДВ в момент, когда ширина канала увеличилась на 10 % и составила $H = 1,1a_0$. Видно значительное различие в длине зоны индукции за вырвавшимся вперед участком фронта ДВ (зона 1), представляющим собой пересжатую ДВ (ножку Маха), и за затухающими участками фронта ДВ (зоны 2). Применение схемы высокого порядка точности позволило зафиксировать также очень узкую зону индукции за поперечной (отраженной) волной. В целом структура ДВ в этот момент полностью аналогична структуре ДВ в канале постоянной ширины.

На рис. 6, *b* изображена структура ДВ в расширяющемся канале, когда его ширина достигла значения $H = 2a_0$. В канале постоянной ширины с тем же значением H расчет [15] показывает наличие четырех поперечных волн (или двух детонационных ячеек) вне зависимости от способа инициирования ДВ (одним источником или несколькими; симметричное или несимметричное). В данном случае все еще остаются только две поперечные волны, но в центральной части фронта (зона 1 на рис. 6, *b*) уже отчетливо видны возмущения фронта пламени как проявление неустойчивости ДВ (см. выше). Из оставшихся двух поперечных волн меньшую интенсивность имеет та, которая расположена вблизи расширяющейся стенки. На рис. 6, *b* (зона 2) за ослабленной волной видна область течения, представляющая собой узкий

протяженный кусок ударно-сжатого, но не прореагировавшего газа (период индукции в нем еще не истек), окруженный со всех сторон реагирующим газом с протекающими в нем реакциями рекомбинации, обеспечивающими тепловыделение. Усиление возмущений зоны 1 и трансформация их в волны сжатия в области нагретого и сжатого газа в зоне индукции может привести при столкновениях таких волн к возникновению «горячих точек» и инициированию ДВ в зоне индукции сразу в нескольких центрах реинициирования (такой процесс иногда называют «взрыв во взрыве»). В свою очередь, это приведет к возникновению новых поперечных волн.

Рис. 6, *в-d* ($H = 4a_0$, $H = 4,1a_0$, $H = 4,2a_0$) демонстрируют динамику возникновения новых поперечных волн (т. е. увеличения числа ячеек) из-за развития подобной неустойчивости при расширении и ослаблении первоначально пересжатых участков фронта ДВ. За небольшой промежуток времени (ДВ прошла расстояние всего около 1 см) число поперечных волн увеличилось с 2 до 7, т. е. наблюдается скачкообразное увеличение числа этих волн в структуре ДВ при постоянном плавном увеличении ширины канала.

На рис. 6, *e* ($H = 4,5a_0$) видно, что из-за многократного взаимодействия между собой интенсивность поперечных волн и их размеры стали примерно одинаковыми (сравни с рис. 6, *d*). Регулярность многофронтной структуры заметно улучшилась и приближается к регулярности, наблюдаемой при численном моделировании ДВ в канале постоянной ширины. И все же в случае распространения ДВ в расширяющемся канале существует дефицит числа поперечных волн. Для волны в канале постоянного сечения с $H = 4,5a_0$ на фронте ДВ должно было бы существовать девять поперечных волн, в расширяющемся же канале многофронтная структура ДВ имеет семь поперечных волн.

В последующих расчетах изучалась динамика распространения ДВ в расширяющемся канале после стадии первого спонтанного увеличения поперечных волн, исследовалась физическая природа последующих равномерных или спонтанных стадий размножения поперечных волн, проводилось сравнение механизмов зарождения новых волн, выяснялись причины самоорганизации упорядоченной структуры в расширяющейся ДВ (существует ли простран-

ственная и временная периодичность в эффектах спонтанного зарождения новых волн в расширяющейся ДВ). Расчеты показали, что, например, к моменту когда $H = 5,5a_0$ (рис. 6, ж), многофронтная структура ДВ по-прежнему состоит из семи поперечных волн. Каких-либо новых возмущений в зоне индукции пока не появилось, требуются дальнейшие расчеты.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены экспериментальные исследования, выявившие две стадии спонтанного образования новых возмущений в расширяющейся детонационной волне. Выполнено двумерное численное моделирование динамики многофронтной структуры детонационной волны в линейно расширяющемся канале. Эффект спонтанного образования новых возмущений и поперечных волн подтвержден расчетами. Основным механизмом размножения поперечных волн является неустойчивость участков фронта ДВ при их выходе из пересжатого состояния и ослаблении при своем расширении.

ЛИТЕРАТУРА

1. Васильев А. А. Околоскритические режимы газовой детонации. Новосибирск, 1995.
2. Васильев А. А. Дифракция многофронтной детонации // Физика горения и взрыва. 1988. Т. 24, № 1. С. 99–107.
3. Васильев А. А. Реиницирование при дифракции многофронтной детонации // Хим. физика. 1997. Т. 16, № 9. С. 107–112.
4. Васильев А. А. Исследование критического инициирования газовой детонации // Физика горения и взрыва. 1983. Т. 19, № 1. С. 121–131.
5. Трошин Я. К., Щелкин К. И. Газодинамика горения. М.: Изд-во АН СССР, 1963.
6. Дремин А. Н., Савров С. Д., Трофимов В. С., Шведов К. К. Детонационные волны в конденсированных средах. М.: Наука, 1970.
7. Субботин В. А. Столкновения поперечных детонационных волн в газах // Физика горения и взрыва. 1975. Т. 11, № 3. С. 486–491.
8. Субботин В. А., Мосунов О. Б. Иницирование взрыва смещением продуктов реакции с несгоревшим газом // Докл. АН. 1993. Т. 328, № 3. С. 352–354.
9. Гельфанд Б. Е., Поленов А. Н., Фролов С. М., Цыганов С. А. К вопросу о возникновении детонации в неравномерно нагретой газовой смеси // Физика горения и взрыва. 1985. Т. 21, № 4. С. 118–123.
10. Knystautas R., Lee J. H. S., Moen I. O., Wagner H. G. Direct initiation of spherical detonation by a hot turbulent gas jet // Proc. 17th Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh, 1979. P. 1235–1245.
11. Митрофанов В. В., Солоухин Р. И. О дифракции многофронтной детонационной волны // Докл. АН СССР. 1964. Т. 159, № 5. С. 1003–1006.
12. Knystautas R., Lee J. H. S., Guirao C. M. The critical tube diameter for detonation failure in hydrocarbon-air mixtures // Combust. Flame. 1982. V. 48. P. 63–83.
13. Васильев А. А., Валишев А. И., Васильев В. А., Панфилова Л. В. Характеристики горения и детонации гидразина и его метилпроизводных // Физика горения и взрыва. 2000. Т. 36, № 3. С. 81–96.
14. Pantow E., Fischer M., Kratzel T. Detonation front structures in hydrogen combustibles // Conference Proc. 16-ICDERS. Univ. of Mining and Metallurgy AGH. Cracow, Poland. 1997. P. 377–380.
15. Троцюк А. В. Численное моделирование структуры двумерной газовой детонации смеси H_2-O_2-Ar // Физика горения и взрыва. 1999. Т. 35, № 5. С. 93–103.
16. Jones D. A., Sichel M., Oran E. S. Reignition of detonations by reflected shocks // Shock Waves. 1995. V. 5. P. 47–57.
17. Pantow E., Fischer M., Kratzel T. Quenching and re-initiation of detonation waves. Modeling and simulation of the phenomena and application for improved detonation arrester design // Proc. 3rd ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference / J.-A. Desideri, C. Hirsch et al. (Eds). Paris, 1996. P. 388–393.
18. Fisher M., Pantow E., Kratzel T. Propagation, decay and re-ignition of detonations in technical structures // Gaseous and Heterogeneous Detonations. Science to Applications / G. Roy, S. Frolov, K. Kailasanath, N. Smirnov (Eds). M.: ENAS Publishers, 1999. P. 197–212.
19. Khasainov B., Priault C., Presles H. -N., Desbordes D. On the mechanism of transition of self-sustained detonation from a tube to a half-space through an annular orifice with central obstacle // 18th Intern. Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems. July 29–August 3, 2001, Seattle, USA. Univ. Washington. CD ISBN 0–9711740–0–8. N 096.
20. Vasil'ev A. A., Trotsyuk A. V. Self-organization of multifront structure in expanding detonation wave // Ibid. N 001.
21. Fujiwara T., Takasu A., Miyasaka T. Detonation Propagation in Variable Cross Section Channels // Ibid. N 108.
22. Левин В. А., Коробейников В. П. Сильный взрыв в горючей смеси газов // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1969. № 6. С. 48–51.

23. **White D. R.** Density induction times in very lean mixtures of D_2 , H_2 , C_2H_2 , and C_2H_4 with O_2 // 11th Symp. (Intern.) on Combustion. Berkeley, 1966. P. 147–154.
24. **Николаев Ю. А.** Модель кинетики химических реакций при высоких температурах // Физика горения и взрыва. 1978. Т. 14, № 4. С. 73–76.
25. **Николаев Ю. А., Зак Д. В.** Согласование моделей химических реакций в газах со вторым началом термодинамики // Физика горения и взрыва. 1988. Т. 24, № 4. С. 87–90.
26. **Численное** решение многомерных задач газовой динамики / Под ред. С. К. Годунова. М.: Наука, 1976.
27. **Николаев Ю. А., Фомин П. А.** О расчете равновесных течений химически реагирующих газов // Физика горения и взрыва. 1982. Т. 18, № 1. С. 66–72.
28. **Николаев Ю. А., Фомин П. А.** Приближенное уравнение кинетики в гетерогенных системах типа газ — конденсированная фаза // Физика горения и взрыва. 1983. Т. 19, № 6. С. 49–58.
29. **Yamamoto S., Daiguji H.** Higher-order-accurate upwind schemes for solving the compressible Euler and Navier-Stokes equations // Computer Fluids. 1993. V. 22, N 2/3. P. 259–270.
30. **Daiguji H., Yuan X., Yamamoto S.** Stabilization of higher-order high resolution schemes for the compressible Navier-Stokes equation // Intern. J. Numer. Methods for Heat and Fluid Flow. 1997. V. 7, N 2/3. P. 250–274.
31. **Lin S.-Y., Chin Y.-S.** Comparison of higher resolution Euler schemes for aeroacoustic computations // AIAA Journal. 1995. V. 33, N 2. P. 237–245.
32. **Chakravarthy S. R., Osher S.** A new class of high accuracy TVD schemes for hyperbolic conservation laws // AIAA Paper N 85-0363. 1985.
33. **Batten P., Leschziner M. A., Goldberg U. C.** Average-state Jacobians and implicit methods for compressible viscous and turbulent flows // J. Comput. Phys. 1997. V. 137. P. 38–78.
34. **Coquel F. and Perthame B.** Relaxation of energy and approximate Riemann solvers for general pressure laws in fluid dynamics // SIAM J. Numer. Anal. 1998. V. 35, N 6. P. 2223–2249.

Поступила в редакцию 18/II 2002 г.