

УДК 534.222.2

С. К. Асланов*, В. Э. Волков**, А. П. Царенко*

*Одесский государственный университет им. И. И. Мечникова

**Одесская государственная академия пищевых технологий

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛН В РАЗЛИЧНЫХ СРЕДАХ

Запропоновано математичний метод наближеного розрахунку просторово-часової структури детонаційного процесу у довільних вибухових системах. Проблема стійкості розв'язана для різних типів хімічної кінетики та неперервного розподілу параметрів за ударним фронтом. Доведена стійкість детонації у твердих речовинах, нестійкість – газових сумішах та перехідний характер у рідинах. Отримана оцінка масштабу ячеї структури детонації, що погоджується з експериментами.

Предложен математический метод приближенного расчета пространственно-временной структуры детонационного процесса в произвольных взрывчатых системах. Проблема устойчивости решена для различных типов химической кинетики и непрерывного распределения параметров за ударным фронтом. Доказана устойчивость детонации в твердых веществах, неустойчивость – в газообразных смесях и переходный характер в жидкостях. Получена оценка масштаба ячеистой структуры детонации, согласующаяся с экспериментами.

The mathematical method of the approximate account of space-time structure of detonation process in any explosive systems is offered. The problem of stability is solved for various types of chemical kinetics and continuous distribution of parameters behind the shock front. The stability of a detonation in firm substances, instability – in gas mixes and transitive character in liquids is proved. The estimation of scale of cellular structure of a detonation which met with experiments is received.

Введение. Многочисленные эксперименты [1–3] свидетельствуют о нестационарном характере пространственной структуры детонационных волн, что объясняется проявлением их неустойчивости. Проблема устойчивости детонации газов, впервые поставленная Щелкиным [4], математически исследовалась многократно [5–12]. Детальный анализ, на основании которого были получены различные критерии неустойчивости, базировался на двухфронтной модели детонационной волны. Ее применение позволяет теоретически объяснить структуру газовой детонации, наблюдаемую в экспериментах [1–3]. Однако, такое моделирование не адекватно детонационному процессу в конденсированных системах и в газовых смесях с “быстрой кинетикой”, для которых интенсивное тепловыделение начинается непосредственно за ударным фронтом [13,14]. Улучшение же модели повлечет значительные трудности при исследовании задачи об устойчивости детонации. Существуют два пути их преодоления: численное интегрирование основной системы уравнений в частных производных [15–17], что также не просто; или построение такой математической модели, которая сделает возможным теоретический анализ устойчивости с сохранением наиболее важных особенностей детонационного процесса как в газах, так и в конденсированных веществах.

Главным дефектом исследований устойчивости двухфронтного стационарного детонационного комплекса [4,6,9,10,12] является то, что создается дополнительный сильный разрыв в газовом потоке позади инициирующего ударного фронта, а воспламенение представляется как нормальный скачок разрежения, который неустойчив сам по себе и дестабилизирует комплекс в целом.

Настоящее исследование состоит в теоретическом анализе устойчивости и структуры детонационных волн на основе математической модели, которая сохраняет непрерывность распределения всех параметров позади ведущего фронта. Естественно, такой подход применим для детонации как газовых, так и конденсированных систем.

1. Задача об устойчивости и ее решение. Рассмотрим плоскую детонационную волну, которая стационарно распространяется в идеальной сплошной среде. Тогда мы имеем три главных области течения в системе координат, связанной с передним скачком “1” ($x = 0$): область исходного вещества “0” ($x < 0$), зона химической реакции с притоком

тепла "3" ($0 < x < L$) и область конечных продуктов детонации "2" ($x > L$). Профили распределений параметров в зоне детонации $[0, L]$ переходят непрерывным образом в постоянные параметры продуктов сгорания.

Уравнения газовой динамики и химической кинетики, описывающие данный процесс, можно записать в виде:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dv}{dt} - v \cdot \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) &= 0, \quad \frac{du_x}{dt} + v \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \quad \frac{d\beta}{dt} = \varphi(\beta, p, v), \\ \frac{dH}{dt} + Q \frac{d\beta}{dt} - v \frac{dp}{dt} &= 0, \quad \frac{du_y}{dt} + v \frac{\partial p}{\partial y} = 0, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

где $d/dt = \partial/\partial t + u_x \cdot \partial/\partial x + u_y \cdot \partial/\partial y$; u_x , u_y – проекции вектора скорости; p , v – соответственно давление и удельный объем; β – доля не прореагировавшего вещества ($\beta = 1$ на переднем фронте); Q – удельное тепловыделение в результате химической реакции; $H = H(\beta, p, v)$ – удельная энтальпия; $\varphi(\beta, p, v)$ – некоторая, достаточно гладкая функция, определяемая скоростью реакции. Предполагается, что распределение параметров в стационарном детонационном комплексе известно, и это распределение может быть найдено из экспериментальных данных или с помощью первых интегралов уравнений (1), выражающих фундаментальные законы сохранения массы, импульса и энергии.

Рассмотрим устойчивость описанного стационарного процесса по отношению к внутренним возмущениям экспоненциального типа. Передний ударный фронт $x = 0$ и плоскость окончания зоны химической реакции $x = L$ получают малые смещения $\epsilon_j = A_j L \cdot \Omega$, где $\Omega = \exp(ihy - i\omega t)$, $j = 1, 2$; $h = 2\pi/\lambda$, λ – длина волны. Возмущения, накладываемые на стационарное состояние, описываются решениями системы линеаризованных уравнений (1). Эти решения представляются в виде $A_j \exp(k_j x + ihy - i\omega t)$ в области постоянных параметров "2" $x > L$, где $j = 3, 4, 5$. Возмущения в детонационной зоне "3" рассматриваются в виде

$$u'_x = U_x(x) \cdot \Omega, \quad u'_y = U_y(x) \cdot \Omega, \quad p' = P(x) \cdot \Omega, \quad v' = V(x) \cdot \Omega, \quad \beta' = B(x) \cdot \Omega,$$

где U_x , U_y , P , V , B должны удовлетворять соответствующей системе обыкновенных линейных однородных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами.

Законы сохранения массы, вектора импульса и энергии используются в качестве граничных условий на возмущенном переднем фронте; ставятся также условия непрерывности возмущений проекций скорости, давления и удельного объема на возмущенной поверхности окончания химической реакции и требования их ограниченности при $x \rightarrow \infty$. Чтобы замкнуть задачу, предположим, что химическая реакция в возмущенном

состоянии протекает до конца также как и в состоянии стационарном, т.е. $\frac{d\beta}{dx} \cdot \epsilon_1 + \beta' = 0$

при $x = 0$ и $\frac{d\beta}{dx} \cdot \epsilon_2 + \beta' = 0$ при $x = L$.

После приведения задачи к безразмерной форме и некоторых преобразований, мы получаем следующую краевую задачу:

$$\frac{dR}{d\tilde{x}} = G(\tilde{x}) \cdot R, \quad R(0) = R_0, \quad R(1) = R_n, \quad (2)$$

$$\text{где } R_0 = A_1 R_{01}; \quad R_n = A_2 R_{n1} + A_3 R_{n2} + A_4 R_{n3} + A_5 R_{n4}; \quad (3)$$

$\tilde{x} = x/L$, $0 < \tilde{x} < 1$ в зоне взрыва; $G(\tilde{x})$ – функциональная матрица размером 5×5 , определяемая распределениями основных параметров процесса в детонационной зоне “3”; $R(\tilde{x}) = \{U_x/u_1, U_x/u_1, P/p_1, V/v_1, B\}$ – вектор-функция, подлежащая определению; u_1, p_1, v_1 – скорость, давление и удельный объем непосредственно за ударным фронтом; $R_{01}, R_{n1}, R_{n2}, R_{n3}, R_{n4}$ – определенные постоянные векторы; $A_j (j=1, \dots, 5)$ – неопределенные константы. Заметим, что элементы функциональной матрицы G и компоненты векторов $R_{01}, R_{n1}, R_{n2}, R_{n3}, R_{n4}$ зависят от многих параметров. Наиболее важные из них: $z = -i\omega L/u_1$ – безразмерное собственное число; $\xi = hL = 2\pi L/\lambda$, $M_1 = u_1/a_1$, $M_2 = u_2/a_2$ – числа Маха непосредственно за ударным фронтом “1” и в продуктах детонации “2” соответственно; $\delta_0 = \rho_0/\rho_1 = u_1/u_0 = v_1/v_0$, $\delta_2 = \rho_2/\rho_1 = u_1/u_2 = v_1/v_2$. При $M_2 = 1$ исследуемая детонационная волна является самоподдерживающейся, а при $M_2 < 1$ – перескаковой детонацией.

Решение возникшей краевой задачи для зоны детонации $0 \leq \tilde{x} \leq 1$ строилось следующим образом: совокупность уравнения (2) и граничного условия $R(0) = R_0$ рассматривалась в качестве задачи Коши, решение которой определялось методом Эйлера. Тогда для разбиений на интервале $[0,1]$:

$$R_n = \left\{ \prod_{i=0}^{n-1} [E + (\tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_i)G(\tilde{x}_{i+1})] \right\} R_0, \quad (4)$$

где $0 = \tilde{x}_0 < \tilde{x}_1 < \dots < \tilde{x}_{n-1} < \tilde{x}_n = 1$; E – единичная матрица. Входящее в это решение неизвестное собственное число $z(\omega)$ будет найдено из требования обязательного удовлетворения второму граничному условию $R(1) = R_n$. Другими словами, подстановка выражения (4) вместе с (3) в (2) приводит к системе пяти линейных однородных алгебраических уравнений с неизвестными константами A_j . Условие равенства нулю определителя этой системы дает характеристическое уравнение:

$$F(z) = 0. \quad (5)$$

В предельном случае одномерных возмущений $\xi = 0$ ($\lambda = \infty$), не искажающих геометрической формы детонационного фронта, $F(z)$ – является полиномом $(n+1)$ -й степени с действительными коэффициентами.

В случае самоподдерживающейся детонации Чепмена-Жуге ($M_2 = 1$) при любом $\xi > 0$, функция $F(z)$ – полином степени $(n+3)$ с действительными коэффициентами. Коэффициенты этих полиномов и, соответственно, характер развития возмущений в детонационной волне определяются распределением параметров в стационарном состоянии, которое связано прежде всего с кинетикой химической реакции.

Данный метод, пригодный для исследования устойчивости детонационной волны с произвольным профилем, был предложен сначала для доказательства одномерной устойчивости детонации литого тротила [18]. Настоящее исследование распространяет этот метод на двумерный случай.

2. Результаты вычислений и анализ структуры детонации. Конкретные вычисления были выполнены на примере детонации литого тротила (первый тип литья) с диаметром заряда $d = 60$ мм [13], $\rho_0 = 1,62$ г/см³ – плотность исходного ВВ, $\rho_2 = 2,11$ г/см³ – плотность продуктов детонации, $u_0 = 6,98$ км/с – скорость распространения детонационной волны, $\kappa_2 = 3,3$ – показатель политропы в продуктах детонации. Использовалось уравнение кинетики [19]:

$$\frac{d\beta}{dt} = -K(1 - \delta_0)p_1(1.02 - \beta)^2 p, \text{ где } K = 2,45 \cdot 10^3 \text{ кбар}^2 \text{с}^{-1}. \quad (6)$$

Все разбиения при вычислениях были равными, и их число варьировалось от $n = 4$ до $n = 10$, что гарантировало достаточную точность. Параметру ξ придавались в каждом случае значения от 1 до 10. И во всех случаях полиномы $F(z)$ имели корни только с определенно отрицательными действительными частями. Последнее обстоятельство показывает устойчивость детонации литого тротила по отношению к возмущениям с соответствующей длиной волны. Как отмечено выше, случай $\xi = 0$ соответствует возмущениям с длинами волн много большими, чем протяженность L детонационной зоны, а случай $\xi = 10$ соответствует возмущениям с длиной волны, которая может быть сравнима $\lambda/L = \pi/5$ с протяженностью зоны детонации. Случай $\xi > 10$ не исследовался, так как соответствующие коротковолновые возмущения будут стабилизироваться вязкими эффектами, которые не приняты во внимание в настоящей модели.

Проведенные вычисления позволяют сделать вывод относительно устойчивости детонации литого тротила по отношению к возмущениям всех длин волн. Следовательно, детонация в литом тротиле сохраняет свою одномерную стационарную структуру. Это объясняет экспериментальные результаты [13] и подтверждает выводы физического анализа [14].

Был также предпринят теоретический анализ развития возмущений в самоподдерживающейся детонационной волне, распространяющейся в смесях $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 7\text{Ar}$ и $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 7\text{He}$. Использовалась модель кинетики Аррениусовского типа, соответствующая двухстадийной химической реакции с задержкой воспламенения в первой стадии и с интенсивным тепловыделением во второй [16]. Константы скорости реакции для сгорания водородо-кислородной смеси были взяты из [16]. Максимальное число равных разбиений принималось также равным 10. Вычисления для различных $\xi > 0$ во всех случаях показали наличие у полиномов $F(z)$ корней с положительной действительной частью, что демонстрирует неустойчивость газовой детонации.

Из всех возможных неустойчивых двумерных возмущений ($\xi > 0$) с различными длинами волн λ первоочередной реализации следует ожидать для тех, которые приводят к максимальному искривлению детонационного фронта. Именно они при переходе к нелинейной стадии развития неустойчивости прежде всего будут определять появление изломов этого фронта, образованных возникающими тройными конфигурациями Маховского типа. Такие тройные точки, перемещающиеся навстречу друг другу вдоль детонационного фронта, как раз и вычерчивают ячеистую картину на закопченных стенках трубы, сжигая исходную смесь в направлении, поперечном к распространению процесса детонации. Приняв указанное требование наибольшего искажения детонационного фронта и предположение об общем среднем уровне начальных возмущений можно единственным образом выделить соответствующую длину волны $\lambda = \lambda_m (\xi = \xi_m)$, которая присутствует в качестве независимого параметра в уравнении (5) для собственных значений z .

Числовой характеристикой искривления возмущенного детонационного фронта, которое развивается за время t , служит отношение амплитуды его смещения $\sim \exp \text{Re}(-i\omega t)$ к масштабу λ этого возмущения ($\lambda \sim 1/\xi$). Говоря об искажении детонационной волны как целой структуры (фронта), имеет смысл рассматривать только интервалы времени, которые не меньше, чем характерное время процесса $\tau = L/u_1$.

Ограничение, накладываемое на мнимую часть величины $z = -i\omega L/u_1 = -i\omega\tau$, сводится как раз к этому требованию.

Характеристика крутизны детонационного фронта, о которой только что говорилось, принимает следующую форму в логарифмическом масштабе:

$$f(\xi) = \operatorname{Re}[z(\xi)] + \ln(\xi), \quad (7)$$

где $\operatorname{Re}[z]$ – действительная часть собственного значения z (одного из корней полинома $F(z)$ из уравнения (5)). Максимум функции $f(\xi)$ определяет величину ξ_m и соответствующий корень полинома z_m . Таким образом, длина волны $\lambda = \lambda(\xi_m)$ возмущения с наиболее быстро увеличивающейся деформацией фронта оказывается определенной. Ее значение λ_m может быть принято в качестве оценки масштаба неоднородностей, которые зафиксированы в экспериментах, так как одну ячейку структуры “пишут” две Маховские конфигурации, которые развиваются на одной длине волны λ_m .

Следует отметить, что самая высокая вероятность реализации соответствует возмущениям с близкими инкрементами нарастания амплитуды. Последние определяются действительной частью собственных чисел $\operatorname{Re}(z)$. Конкретные вычисления для детонации вышеупомянутых смесей показывают, что при $\xi = \xi_m$ соответствующий полином имеет такой корень z_* с вещественной частью, близкой к $\operatorname{Re}(z_m)$, и с мнимой частью близкой к нулю. Это удваивает вероятность реализации для соответствующих возмущений. Минимум частоты $\operatorname{Im}(z_*)$ вышеупомянутого корня z_* ($\operatorname{Im}(z_*) \approx 0$) служит дополнительным свидетельством в пользу реализации таких возмущений, потому что декремент убывания амплитуды акустических колебаний при диссипативных потерях пропорционален квадрату их частоты.

Метод определения масштаба пульсационной структуры детонации, основанный непосредственно на решении проблемы устойчивости, построен в [20] и неоднократно использовался [20–22] для двухфронтной модели детонации (волна детонации с прямоугольным профилем). В настоящей работе этот метод приложен для модели детонационной волны с непрерывным распределением параметров позади ударного фронта. Это приводит к результатам, которые сведены в Таблицу 1.

Для смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 7\text{Ag}$ получена оценка $\xi_m \approx 0,56$. Это соответствует $\lambda_m \approx 15L_1$, где L_1 является протяженностью зоны индукции в стационарном состоянии. Итак, размер детонационной ячейки в этом конкретном случае может быть оценен величиной $\Delta \approx 15L_1$, или используя значение L_1 из [16], имеем $\Delta \approx 0,34/p_0$ (см), где p_0 – давление первоначальной смеси (МПа $\times 81$). Достигнутый теоретический результат находится в хорошем согласии с опытными измерениями [23], где $\Delta = (0,27 + 0,4)/p_0$ (см), и в несколько худшем – с данными численного расчета [16]: $\Delta = (10 + 12)L_1 = (0,225 + 0,27)/p_0$ (см).

Для смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 7\text{He}$ мы имеем такие оценки: $\xi_m \approx 0,48$ и $\Delta = \lambda_m \approx 18L_1 = 0,9/p_0$ (см).

Согласно вычислениям [16]: $\Delta = (10 + 12)L_1 = (0,5 + 0,6)/p_0$ (см), а экспериментам [23] отвечает $\Delta = (0,6 + 1,0)/p_0$ (см).

Непосредственно видно, что в рассмотренных случаях размер ячейки, найденный теоретически, попадает в экспериментальный интервал. Это обстоятельство свидетельствует в пользу надежности построенной теории.

Соответствующий анализ устойчивости и структуры детонационной волны в жидких ВВ выполнен для тротила и нитрометана на основе Аррениусовской кинетики химической реакции. Его результаты приведены в Таблице 2 и согласуются с экспериментальными данными [13]. Численное интегрирование дифференциальных уравнений газовой динамики и химической кинетики дает те же самые результаты [24].

Заключение. Настоящее математическое исследование устойчивости и структуры детонационных волн в различных средах даст возможность сделать следующие выводы:

- детонационные волны в твердых ВВ устойчивы и должны сохранять свою одномерную стационарную структуру (единственной причиной ее пространственно-временной нерегулярности являются неоднородности в исходных ВВ или граничные эффекты);
- детонационные волны в газообразных смесях неустойчивы и эта неустойчивость является основой их регулярной пространственно-временной структуры (главная характеристика этой структуры – размер ячейки – оценена теоретически);
- детонационные волны в жидких ВВ могут быть как устойчивы (с гладким фронтом), так и неустойчивы – с пространственно-временной структурой.

Исходные данные:

Таблица 1.

Результаты анализа структуры газовой детонации

Смесь	Размер ячеек		
	Настоящий метод	Численный анализ [16]	Эксперимент [23]
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 7\text{Ar}$	$0.34/p_0$	$(0.225 \pm 0.27) / p_0$	$(0.27 \pm 0.4) / p_0$
$2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 7\text{He}$	$0.9/p_0$	$(0.5 \pm 0.6) / p_0$	$(0.6 \pm 1.0) / p_0$

Таблица 2.

Результаты по устойчивости детонации жидких веществ

Энергия активации (Ккал/моль)	Протяженность зоны детонации	Скорость детонации (м/с)	Устойчивость
Жидкий тротил			
41.1	$1.1 \cdot 10^{-3}$ см	6406	Одномерная неустойчивость
30.0	$7.3 \cdot 10^{-3}$ см	6406	Устойчивость
Нитрометан			
53.6	2400 Å	6460	Одномерная неустойчивость
40.0	775000 Å	6460	Устойчивость

1. Щелкин К.И., Трошин Я.К. Газодинамика горения. – М.: АН СССР, 1963. – 255с.
2. Войсковский Б.В., Минтрофанов В.В., Топчий М.Е. Структура детонационного фронта в газах. – Новосибирск. АН СССР, 1963. – 195с.
3. Солоухин Р.И. Ударные волны и детонация в газах. – М.: АН СССР, 1963. – 175с.
4. Щелкин К.И. Два случая неустойчивости горения. //ЖЭТФ. – 1959. – Т.36, №2. – С.73-88.
5. Зейдель Р.М. Об устойчивости детонационных волн в газовых смесях. //ДАН СССР. – 1961. – Т.136, №5. – С.1142-1145.
6. Erpenbeck, J.J. Stability of Steady-State Equilibrium Detonations //Phys. Fluids. – 1962. – V.5, №6. – P.604-614.
7. Пухлячев В.В. Об устойчивости детонации Чепмена-Жуге //ДАН СССР. – 1963. – Т.149, №4. – С.798-801.
8. Erpenbeck, J.J. Stability of Idealized One-Reaction Detonation //Phys. Fluids. – 1964. – V.7, №5. – P.684-696.

9. Асланов С.К. Критерий неустойчивости детонации Чепмена-Жуге в газе //ДАН СССР. - 1965. Т.163. №3. - С.667-670.
10. Асланов С.К. Исследование газодинамической неустойчивости детонационной волны в газовой смеси //Прикладная механика. - 1967. Т.3. №3. - С.107-115.
11. Erpenbeck, J.J. Theory of Detonation Stability //Twelve Symposium on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburg, PA. - 1969. - P.711-721.
12. Левин В.А., Соломха Б.П., Чикова С.П. Об устойчивости плоской детонационной волны //Научные труды ИИИ Механики МГУ - 1974. - №32. - С.44-59.
13. Дремин А.Н., Савров С.Д., Трофимов В.С., Шведов К.К. Детонационные волны в конденсированных средах. - М.:АН СССР, 1970. - 640с.
14. Дремин А.Н. Пульсационный детонационный фронт //ФГВ. - 1983. - Т.19. №4. - С.15-23.
15. Fickett, W., Wood, W.W. Flow Calculation for Pulsating One-Dimensional Detonations // Phys. Fluids. - 1966. - V.9. №5. - P.903-916.
16. Taki, S., Fujiyara, T. Numerical Analysis of Two-Dimensional Nonsteady Detonation //AIAA Journal. - 1978. - V.16. №1. - P.73-77.
17. Марков В.В. Численное моделирование формирования многофронтной структуры детонационной волны //ДАН СССР. - 1981. - Т.258. №2. - С.314-317.
18. Асланов С.К., Волков В.Э. Устойчивость детонации конденсированных взрывчатых веществ //9-й Всесоюзный Симп. по Горению и Взрыву. Том "Детонация". - 1996. - С.3-5.
19. Капель Г.И., Дремин А.Н. Разложение литого тротила в ударных волнах //ФГВ. - 1977. - Т.13. №1. - С.83-92.
20. Асланов С.К., Голынский О.С. К расчету внутренней структуры детонационной волны //ДАН СССР. - 1981. - Т.260. №5. - С.1154-1157.
21. Асланов С.К., Малорин В.Л. Теория неустойчивости и расчет элементов пульсационной структуры детонационной волны //2-й Всесоюз. Конф. "Лаврентьевские чтения". - Киев. - 1985. - С.21-23.
22. Maloryan, V.L., Aslanov, S.K. A theory of the Detonation Wave Instability and Calculation of the Pulser Front Structure Scales //12th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems Michigan. - 1989. - P.17-19.
23. Strehlow, R.A., Adamczyk, A.A., Stiles, R.A. Transient Studies of Detonation Waves //Astronautica Acta. - 1969. - V.17. №10. - P.509-527.
24. Mayder, Ch.L. Numerical Modelling of Detonations. - University of California Press. Berkley-Los Angeles-London. - 1979. - 120p.