УДК 544.452+544.454

ДЕТОНАЦИЯ КАК ГОРЕНИЕ В СВЕРХЗВУКОВОМ ПОТОКЕ ГОРЮЧЕЙ СМЕСИ

А. А. Васильев

¹Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, gasdet@hydro.nsc.ru ²Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск

Классические модели стационарного распространения волн горения и детонации в горючей смеси описывают возрастание энтропии системы до максимума при дефлаграционном (дозвуковом) сгорании смеси, ведомом медленными процессами теплопроводности и диффузии. Однако при детонационном (сверхзвуковом) режиме, одну из ведущих ролей в распространении которого играет головная ударная волна, модели предсказывают, что горючая система при завершении химической реакции «выбирает» минимальное возрастание энтропии. Это не согласуется с формулировкой химической термодинамики о том, что энтропия системы при завершении самопроизвольной необратимой химической реакции и достижении равновесия достигает своего максимального значения. В работе показано, что вывод классических моделей о минимальности возрастания энтропии при детонации устраняется, если рассматривать детонацию как процесс горения смеси, предварительно подвергнутой необратимому процессу сжатия и нагрева исходной смеси в головной ударной волне (в химпике) с соответствующим увеличением энтропии исходной смеси и последующим энерговыделением смеси в необратимом процессе превращения исходной смеси в продукты при химической реакции.

Ключевые слова: горение, детонация, необратимые процессы, возрастание энтропии, химическое равновесие продуктов, химическое энерговыделение в дозвуковых и сверхзвуковых потоках.

DOI 10.15372/FGV20220607

ВВЕДЕНИЕ

Идеализированные классические модели детонации с плоским фронтом, предложенные в конце XIX в. Михельсоном, Чепменом, Жуге и развитые затем Грибом, Зельдовичем, Нейманом, Дёрингом, до сих пор пользуются определенной востребованностью при оценке скоростных и газодинамических параметров. И это несмотря на современные представления о заметно отличающейся от классической структуре детонационной волны как сложного газодинамического комплекса из волн сжатия и разрежения, ударно-волновых конфигураций регулярного и маховского типов, поперечных волн, зон индукции и реакции с неоднородными по пространству и времени распределениями параметров и т. д. Основные положения этих моделей широко представлены в научной и учебной литературе и хорошо известны специалистам (например, [1-3]).

Среди основных выводов этих теорий существование двух стационарных (самоподдерживающихся) режимов распространения: детонационного (со сверхзвуковой скоростью) и дефлаграционного (с дозвуковой скоростью). Эти режимы определяются точками касания прямых Михельсона — Рэлея (геометрический аналог законов сохранения массы и импульса) с адиабатой энерговыделения (аналог закона сохранения энергии — кривая Гюгонио). В точках касания химическая реакция считается завершившейся, при этом основные газодинамические и химические параметры достигли своих стационарных значений. Для энтропии продуктов горения и детонации это свидетельствует о наличии экстремума, т. е. одновременно с касанием между собой прямой Михельсона Рэлея и адиабаты Гюгонио происходит касание с ними линии постоянной энтропии (адиабаты Пуассона). Причем согласно классическим теориям в детонационной точке (относительно исходного состояния смеси O, индекс d) линия постоянной энтропи
и $S_d={\rm const}$ касается адиабаты энерговыделения снизу, а в дефлаграционной точке (индекс df) линия S_{df} = const касается адиабаты энерговыделения сверху. Это означает, что в дозвуковой области (где линия постоянной энтропии касается адиабаты Гюгонио сверху) энтропия продуктов сгорания характеризуется экстремумом с максимальным

[©] Васильев А. А., 2022.

значением. А вот с точкой касания в сверхзвуковой области ситуация иная — линия постоянной энтропии с касанием адиабаты Гюгонио снизу при детонации характеризуется экстремумом со свойством минимальности, причем $S_d < S_{df}$. Другими словами, одним из выводов классических теорий является то, что в отличие от горения система при детонации «выбирает» режим распространения с минимальным увеличением энтропии. Нужно отдать должное авторам классических детонационных теорий за то, что они в своих работах обратили на это внимание, но оставили без детального анализа и объяснения. Вопрос о том, почему детонация «выбирает» режим с наименьшим возрастанием энтропии, является открытым до сих пор. В химической термодинамике возрастание энтропии служит критерием направления необратимых химических реакций, причем при завершении реакции и достижении состояния равновесия энтропия горючей смеси должна достигать максимального значения, $S = S_{\text{max}}$. При достижении равновесия соответствующие термодинамические потенциалы (внутренняя энергия, энтальпия, энергии Гиббса и Гельмгольца) становятся постоянными — $(dU)_{S,V} = 0$, $(dH)_{S,P} = 0, (dA)_{T,V} = 0, (dG)_{T,P} = 0, a \text{ ca-}$ ми потенциалы достигают минимальных значений — $U = U_{\min}, H = H_{\min}, A = A_{\min},$ $G = G_{\min} \ [4].$

Оценочный вывод о меньших необратимых потерях при детонации по сравнению с процессами горения спустя много лет вызвал ажиотаж при разработке двигателей нового поколения, работающих в режимах детонационного сжигания горючих смесей. Получено множество экспериментальных результатов по данной тематике, опубликованы сотни статей, но вопрос об эффективности по-прежнему открыт. Этот момент служит дополнительным аргументом необходимости рассмотрения данной проблемы.

В настоящей работе предпринята попытка прояснить вопрос о возрастании энтропии при горении и детонации и о соотношении между энтропийными величинами при протекании необратимых процессов, каковыми являются ударно-волновое воздействие на горючую смесь и химические реакции. Следует обратить особое внимание на то, что в классических моделях горения и детонации химическая реакция постулируется завершившейся в точках касания! Для лучшего изложения проблемы автор вынужден кратко повторить основы классических теорий, описывающих распространение процессов с химическими реакциями, и воспользоваться необходимыми формулами.

ИДЕАЛИЗИРОВАННЫЕ ОДНОМЕРНЫЕ МОДЕЛИ ГОРЕНИЯ И ДЕТОНАЦИИ

Классическая одномерная теория детонации и горения базируется на законах сохранения массы, импульса и энергии, записываемых в системе неподвижного фронта волны для трубки тока постоянного сечения:

$$\rho_0 w_0 = \rho w, \qquad P_0 + \rho_0 w_0^2 = P + \rho w^2,$$

$$H_0 + w_0^2/2 = H + w^2/2 + Q.$$

Здесь w_0 и w — скорости втекающего во фронт и вытекающего из фронта потока, $V = 1/\rho$ удельный объем одного моля на единицу массы (величина, обратная плотности смеси ρ), P давление, H — энтальпия, Q — удельное энерговыделение смеси (например, [1, 2]), индексом 0 обозначены параметры в начальном состоянии.

Первые два уравнения дают

$$\frac{P - P_0}{V - V_0} = -\rho_0^2 w_0^2 = \text{const},$$

т. е. уравнение прямой в плоскости (*P*, *V*), которую называют прямой Михельсона — Рэлея. Из этого уравнения можно вывести два полезных соотношения для скоростей:

$$w_0^2 = V_0^2 \frac{P - P_0}{V_0 - V}, \quad w^2 = V^2 \frac{P - P_0}{V_0 - V},$$

которые после подстановки в уравнение энергии позволяют получить несколько вспомогательных формул для энтальпии *H* и внутренней энергии *U*:

$$H - (H_0 + Q) = (w_0^2 - w^2)/2 =$$

= $(P - P_0)(V_0 + V)/2,$
$$U - (U_0 + Q) = (w_0^2 - w^2)/2 + P_0V_0 - PV =$$

= $(P + P_0)(V_0 - V)/2.$

В рамках модели идеального газа с уравнением

$$P = \rho RT = RT/V$$

энтальпия выражается формулой

$$H = U + PV = \frac{\gamma}{\gamma - 1}PV$$

(где γ — показатель адибаты), потому уравнение энергии (для H или U) приобретает вид P = F(V,Q). Эта функция называется адиабатой энерговыделения (или адиабатой Гюгонио):

$$\frac{P}{P_0} \left(\frac{V}{V_0} \frac{\gamma+1}{\gamma-1} - 1 \right) = \frac{\gamma+1}{\gamma-1} - \frac{V}{V_0} + 2\frac{Q}{P_0V_0}.$$

После преобразований эта функция превращается в уравнение гиперболы:

$$\left(\frac{P}{P_0} + \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}\right) \left(\frac{V}{V_0} - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}\right) =$$
$$= 1 - \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}\right)^2 + 2\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}\frac{Q}{P_0V_0}.$$

При Q = 0 получаем уравнение ударной адиабаты:

$$\left(\frac{P}{P_0} + \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}\right) \left(\frac{V}{V_0} - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}\right) =$$
$$= 1 - \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}\right)^2 = \text{const.}$$

Следует особо отметить, что ударная адиабата и адиабата Гюгонио представляют собой геометрическое место точек состояний соответственно за ударной волной (УВ) и в продуктах реакции с энерговыделением Q.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ ИДЕАЛИЗИРОВАННЫХ МОДЕЛЕЙ

Линии $P = P_0 = \text{const}$ и $V = V_0 = \text{const}$ делят плоскость (P, V) на четыре квадранта: нефизические I и III, сверхзвуковой II и дозвуковой IV (рис. 1). Адиабата энерговыделения как гипербола сдвинута относительно точки исходного состояния O так, что точка O лежит вне гиперболы. Ударная адиабата также является гиперболой, но она проходит через начальную точку. Из точки O к адиабате энерговыделения как гиперболе можно провести множество прямых. Существует три варианта взаимного расположения адиабаты энерговыделения



Рис. 1. Типичная (*P*, *V*)-диаграмма горючей смеси

и прямой: a) пересечения нет, б) есть пересечение в двух точках, в) осуществляется касание прямой и адиабаты.

Введем безразмерные переменные:

$$y = \frac{P}{P_0}, \quad x = \frac{V}{V_0}, \quad q = \frac{Q}{\gamma P_0 V_0} = \frac{Q}{c_0^2},$$

 $\eta = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}, \quad M_0 = \frac{w_0}{c_0}.$

Тогда уравнение прямой Михельсона — Рэлея можно представить в виде

$$\frac{y-1}{x-1} = -\frac{w_0^2}{P_0 V_0} = -\gamma \frac{w_0^2}{c_0^2} = -\gamma \mathcal{M}_0^2.$$

Правая часть всегда отрицательна: наклон прямой Михельсона — Рэлея

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_{\rm MR} = -\gamma M_0^2 = -\frac{y-1}{1-x};$$

левая часть отрицательна при одновременном выполнении условий: а) y > 1 $(P > P_0), x < 1$ $(V < V_0)$ — квадрант II для сверхзвуковых детонационных процессов на рис. 1, б) y < 1 $(P < P_0), x > 1$ $(V > V_0)$ — квадрант IV для процессов дозвукового горения на рис. 1. Условие а) соответствует сжатию среды с повышением давления, условие б) — расширению среды с понижением давления. На рис. 1 представлен типичный график состояний горючей системы и ее продуктов: O — исходное состояние, 1 — адиабата энерговыделения (адиабата Гюгонио), 2 — ударная адиабата, 3 и 4 — прямые Михельсона — Рэлея, касающиеся адиабаты Гюгонио 1 в точках D (самоподдерживающаяся детонация, квадрант II) и F (самоподдерживающаяся дефлаграция, квадрант IV). Линии 1–4 построены относительно O.

В квадранте $P > P_0, V < V_0$ адиабата Гюгонио описывает конечные состояния сверхзвуковых режимов распространения детонации, а в квадранте $P < P_0, V > V_0$ — состояние дозвуковых режимов дефлаграционного горения, в том числе режима нормального горения. А прямые Михельсона — Рэлея для детонационного квадранта (из точки начального состояния O), кроме конечных состояний при частичных энерговыделениях смеси и конечном энерговыделении на адиабате Гюгонио, описывают дополнительно совокупность состояний исходной смеси за УВ, распространяющимися с различными скоростями (сверхзвуковыми). Например, точка B на ударной адиабате при пересечении ее прямой Михельсона — Рэлея (см. рис. 1). Ударная адиабата в безразмерных переменных имеет вид $(y+\eta)(x-\eta) = 1 - \eta^2$ или представляется формулой

$$y = \frac{1 - \eta x}{x - \eta} = \frac{(\gamma + 1) - (\gamma - 1)x}{(\gamma + 1)x - (\gamma - 1)}.$$

Первое начало классической термодинамики (нереагирующие потоки) формулируется в виде $\delta Q = dU + P \cdot dV = T \cdot dS$, второе начало - $\Delta S \ge 0$. Здесь δQ — подведенное к системе тепло, dU — изменение внутренней энергии системы (одного из термодинамических потенциалов), $P \cdot dV$ — работа, совершенная системой, *T* — температура, *dS* — дифференциал энтропии. Для замкнутой системы $\delta Q = 0$ и S =const — адиабатический процесс. Вид уравнения адиабаты (называемой адиабатой Пуассона) для идеального газа получается из условий dS = 0 и $dU + P \cdot dV = c_v dT + RT \cdot dV/V = 0.$ Используя для идеального газа соотношения $c_p - c_v = R$ и $\gamma = c_p/c_v$ (где c_p, c_v — удельная теплоемкость соответственно при постоянных давлении и объеме), получаем уравнение адиабатического процесса PV^{γ} = const $(TV^{\gamma-1} = \text{const}, PT^{-\gamma/(\gamma-1)} = \text{const}),$ в безразмерном виде: $yx^{\gamma} = \text{const.}$ Следует особо отметить, что эта формула является уравнением обратимого процесса в отличие от ударной адиабаты (и адиабаты Гюгонио) как совокупности дискретных точек конечных состояний, не связанных друг с другом причинно-следственной связью.

Скорость звука определяется производной уравнения адиабаты Пуассона:

$$c^2 = \left(\frac{dP}{d\rho}\right)_S = \frac{\gamma P}{\rho}$$

В начальной точке О

$$c_0^2 = \left(\frac{dP}{d\rho}\right)_S \approx \left(\frac{P-P_0}{\rho-\rho_0}\right)_S$$

Скорость звука на ударной адиабате определяется соотношением

$$c^{2} = \left(\frac{dP}{d\rho}\right)_{SW} = -\left(\frac{P_{0}V^{2}}{V_{0}}\right)\left(\frac{dy}{dx}\right)_{SW}$$

В начальной точке О

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_{SW} \to -\gamma,$$

$$c^2 = \left(\left(\frac{dP}{d\rho}\right)_{SW}\right)_O = \left(\left(\frac{dP}{d\rho}\right)_S\right)_O = c_0^2$$

т. е. наклон классической адиабаты Пуассона и наклон ударной адиабаты совпадают — наблюдается касание этих линий.

Уравнение адиабаты энерговыделения (адиабаты Гюгонио) в безразмерных переменных выглядит так: $y = (1 - \eta x + 2\eta \gamma q)/(x - \eta)$. Из этого уравнения можно получить координаты двух важных точек, соответствующих режиму сгорания при $P = P_0 = \text{const}$ и мгновенному взрыву смеси в бомбе при $V = V_0 = \text{const}$. В случае, когда $P = P_0 = \text{const}$ (y = 1), конечное состояние продуктов достигается при $x_p = 1 + 2\eta \gamma q/(1 + \eta) = 1 + (\gamma - 1)q$, а в случае $V = V_0 = \text{const}$ (x = 1) — при $y_v = 1 + 2\eta \gamma q/(1 - \eta) = 1 + \gamma(\gamma - 1)q$.

Если исходная смесь покоится, то из уравнения сохранения массы $\rho_0 D = \rho(D-u)$ получается очень важное соотношение для скорости газового потока за фронтом: $u = D(1-\rho_0/\rho)$. Из этого соотношения видно, что при сжатии газа $(\rho_0/\rho = V/V_0 < 1)$ за ударным фронтом детонационной волны (ДВ) поток движется в том же направлении, что и фронт ДВ (u/D > 0), а при $\rho_0/\rho = V/V_0 > 1$ (расширение продуктов сгорания) направление газового потока противоположно направлению скорости фронта волны горения (u/D < 0). Для этого же случая уравнение сохранения импульса $P_0 + \rho_0 D^2 = P + \rho(D-u)^2 = P + \rho_0 D^2 - \rho_0 uD$ приводит-



Рис. 2. Идеализированные структуры ДВ и волны горения

ся к виду $P = P_0 + \rho u D$, из которого следует, что в волне горения давление в ходе химической реакции уменьшается (u/D < 0) и градиент давления, за счет которого газ приходит в движение и приобретает скорость, направлен от фронта пламени назад, в противоположную сторону от направления скорости фронта пламени. На рис. 2 представлены идеализированные схемы одномерных структур фронта ДВ (верхний чертеж: 0 — исходная смесь, 1 — головной фронт ДВ — ударная волна, 2 — зона индукции, 3 — зона химической реакции, 4 продукты детонации) и фронта горения (нижний рисунок: 1 — исходная смесь, 2 — зона прогрева, 3 — зона химической реакции, 4 — продукты горения). При детонации массовая скорость частиц и во всех зонах направлена вслед за головной УВ 1. При горении, ведомом низкоскоростными процессами теплопроводности и диффузии (от горячих продуктов реакции вперед в горючую смесь), продукты горения текут в сторону, противоположную движению фронта пламени. Особо отметим, что скорости распространения пламени определяются по отношению к покоящейся исходной смеси.

Информацию о точках касания прямых Михельсона — Рэлея и адиабаты энерговыделения можно получить из анализа совместной системы законов сохранения:

$$y = (1 + \gamma M_0^2) - \gamma M_0^2 x,$$
$$y = \frac{1 - \eta x + 2\eta \gamma q}{x - \eta}.$$

Приравнивая правые части уравнений, получаем после преобразований квадратное уравнение классического вида $ax^2 + bx + c = 0$, корнями которого являются $x_{1,2} = [-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}]/2a$ (в данном случае c — коэффициент, не имеющий отношения к введенной выше скорости звука). Здесь $a = \gamma M_0^2, b = -(1+\eta)(1+\gamma M_0^2),$ $c = 1 + (1 + \gamma M_0^2 + 2\gamma q)\eta$. В зависимости от подкоренного выражения возможны три случая: 1) при $b^2 - 4ac < 0$ действительных решений нет (прямая Михельсона — Рэлея не имеет точек пересечения с адиабатой энерговыделения); 2) при $b^2 - 4ac > 0$ есть два решения с соотношениями между ними в виде формул Виета $x_1 + x_2 = -b/a, x_1 x_2 = c/a$ (прямая пересекает адиабату Гюгонио в двух точках); 3) при $b^2 - 4ac = 0$ $x_1 = x_2 = -b/2a$ (прямая и адиабата Гюгонио касаются друг друга). Равенство нулю подкоренного выражения в точке касания дает дополнительное соотношение между параметрами смеси:

$$(1+\eta)^2 (1+\gamma M_0^2)^2 - 4\gamma M_0^2 \{(1+\gamma M_0^2+2\gamma q)\eta+1\} = 0.$$

Данное соотношение преобразуется сначала к виду

$$\gamma^2 (1 - \eta)^2 M_0^4 -$$
$$- 2\gamma M_0^2 \{1 - \eta^2 + 4\eta\gamma q\} + (1 + \eta)^2 = 0,$$

а затем к виду

$$\mathbf{M}_0^4 - 2\mathbf{M}_0^2 \{1 + q(\gamma^2 - 1)\} + 1 = 0.$$

Решения этого уравнения —

$$(\mathbf{M}_0^2)_{1,2} = \{1 + q(\gamma^2 - 1)\} \pm \sqrt{\{1 + q(\gamma^2 - 1)\}^2 - 1}.$$

Отсюда получается важное соотношение между числами Маха в детонационной и дефлаграционной точках касания

$$(M_0)_1(M_0)_2 = (M_0)_d(M_0)_{df} = 1$$

или между детонационной и дефлаграционной скоростями $D_d D_{df} = c_0^2$. Обычно $q \gg 1$, потому значение числа Маха для детонации (знак плюс перед корнем) дается формулой

$$(\mathcal{M}_0^2)_d \approx 2(\gamma^2 - 1)q$$

или $D_{0d} \approx \sqrt{2(\gamma^2 - 1)Q}$, а для дефлаграции (знак минус перед корнем)

$$(M_0^2)_{df} \approx 0.5/[(\gamma^2 - 1)q]$$

или $D_{0df} \approx 1/\sqrt{2(\gamma^2 - 1)Q}$. Из этих формул видно, что увеличение Q приводит к возрастанию скорости детонации и уменьшению скорости дефлаграционного горения.

В точке касания к детонационной ветви адиабаты Гюгонио

$$\begin{aligned} x_{*d} &= -b/2a = (1+\eta)(1+\gamma M_{0d}^2)/2\gamma M_{0d}^2 = \\ &= (1+\gamma M_{0d}^2)/[(\gamma+1)M_{0d}^2] \approx \gamma/(\gamma+1), \\ y_{*d} &= 1+\gamma M_{0d}^2(1-x_{*d}) = (\gamma M_{0d}^2+1)/(\gamma+1) = \\ &= x_{*d} M_{0d}^2 \approx \gamma M_{0d}^2/(\gamma+1). \end{aligned}$$

Поскольку при данной скорости на головном ударном фронте ДВ $y_{SW} = [2\gamma M_{0d}^2 - (\gamma - 1)]/(\gamma+1) \approx 2\gamma M_{0d}^2/(\gamma+1)$, то $y_{SW} \approx 2y_{*d}$, т. е. давление продуктов детонации составляет примерно половину давления на фронте УВ, движущейся с такой же скоростью. В точке касания адиабаты Гюгонио с дефлаграционной ветвью в формуле для x_{*df} нужно использовать число Маха дефлаграции $M_{0df} = 1/M_{0d} \ll 1$, тогда

$$\begin{split} x_{*df} &= -b/2a = (1+\eta)(1+\gamma M_{0df}^2)/2\gamma M_{0df}^2 = \\ &= (1+\gamma M_{0df}^2)/[(\gamma+1)M_{0df}^2] \approx \\ &\approx 1/[(\gamma+1)M_{0df}^2] \approx 2(\gamma-1)q, \\ &y_{*df} = 1+\gamma M_{0df}^2(1-x_{*df}) = \\ &= (\gamma M_{0df}^2+1)/(\gamma+1) = x_{*df} M_{0df}^2 \approx 1/(\gamma+1). \end{split}$$

Скорость звука в продуктах реакции в точках касания совпадает со скоростью вытекающего потока продуктов относительно фронта волны:

$$w = c: \quad c^2 = \left(\frac{dP}{d\rho}\right)_S = \frac{\gamma P}{\rho} =$$
$$= \frac{-P_0 V^2}{V_0} \left(\frac{dy}{dx}\right)_S = \gamma P_0 V_0 M_0^2 \left(\frac{V^2}{V_0^2}\right) =$$
$$= \frac{w_0^2 V^2}{V_0^2} = w^2$$

(как для детонации, так и для дефлаграции).

Другими словами, скорость потока продуктов реакции относительно фронта равна местной скорости звука и M = w/c = 1 (звуковое истечение). Это знаменитое условие Чепмена — Жуге, известное также по идентичной формуле D = u + c.

ИЗМЕНЕНИЕ ЭНТРОПИИ ПРИ ГОРЕНИИ И ДЕТОНАЦИИ

В химической термодинамике во внутреннюю энергию, как один из термодинамических потенциалов (а также еще в энтальпию и потенциалы Гиббса и Гельмгольца), вводится дополнительный химический потенциал, характеризующий изменение числа молей:

$$dU = T \cdot dS - P \cdot dV + \sum_{i} \mu_i \, dn_i,$$

где μ и n — химический потенциал и число молей данного химического компонента.

Поскольку точки касания характеризуют стационарный процесс распространения с завершившейся химической реакцией, конечный состав считается дальше неизменным $(dn_i = 0)$, потому последней суммой можно пренебречь. Тогда можно записать $dS = \frac{c_v dT}{T} + \frac{R dV}{V}$, и после интегрирования (в случае с исходным состоянием в точке O) получаем

$$\frac{S - S_0}{R} = \ln\left(\frac{T^{1/(\gamma - 1)}V}{T_0^{1/(\gamma - 1)}V_0}\right) =$$
$$= \frac{1}{(\gamma - 1)\ln(yx^{\gamma})} = \frac{\hat{S}(y, x)}{\gamma - 1}.$$

Это основная формула для оценок изменения энтропии продуктов реакции относительно исходной смеси, а также для изменения энтропии на ударной адиабате. Первая производная от энтропийной функции

$$\frac{dS}{dx} = \frac{1}{yx^{\gamma}}[y'x^{\gamma} + y\gamma x^{\gamma-1}] = \frac{y'}{y} + \frac{\gamma}{x}$$

Здесь второе слагаемое — положительное число, а первое — отрицательное, поскольку $y' = [(1 - \eta x + 2\eta \gamma q)/(x - \eta)]' = -(1 - \eta^2 + 2\eta \gamma q)/(x - \eta)^2 < 0$. Знакопеременное выражение для $\frac{d\hat{S}}{dx}$

может быть равно нулю, что будет свидетельствовать о наличии экстремума. Для его нахождения имеем

$$\frac{d\tilde{S}}{dx} = \frac{-1}{x-\eta} - \frac{\eta}{1-\eta x + 2\eta\gamma q} + \frac{\gamma}{x} = 0.$$

Эту формулу можно преобразовать в квадратное уравнение классического вида $ax^2 + bx + c = 0$, корнями которого являются $x_{1,2} = [-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}]/2a \ (a = \gamma > 0, b = -(\gamma + 1)(1 + \eta + 2\gamma\eta q) = -2\gamma[1 + (\gamma - 1)q] < 0, c = \gamma(1 + 2\gamma\eta q) > 0)$. Поскольку $q \gg 1$, то $x \approx (\gamma - 1)q \pm (\gamma - 1)q \cdot [1 - 2\gamma\eta q/(\gamma - 1)^2 q^2]^{1/2} \approx (\gamma - 1)q \pm (\gamma - 1)q \cdot [1 - \gamma/(\gamma^2 - 1)q]$, откуда $x_+ \approx 2(\gamma - 1)q = x_{df}$, $x_- \approx \gamma/(\gamma + 1) = x_d$, совпадающие с координатами точек касания для дефлаграции (+) и детонации (-).

Представляет интерес поведение энтропийной функции \hat{S} вдоль прямой Михельсона — Рэлея $y = 1 - \gamma M^2(x-1)$, т. е. при протекании химической реакции от начала (точка O) до завершения в стационарных волнах детонации (D) и дефлаграции (F). Первая производная

$$\frac{d\hat{S}}{dx} = \frac{y'}{y} + \frac{\gamma}{x} = -\frac{\gamma M^2}{1 - \gamma M^2 (x - 1)} + \frac{\gamma}{x} = -\frac{\gamma M^2 x + \gamma [1 - \gamma M^2 (x - 1)]}{x [1 - \gamma M^2 (x - 1)]}.$$

Числитель обращается в нуль при $x = (1 + \gamma M^2)/[(\gamma+1)M^2]$. Для детонационного квадранта $M^2 \gg 1$, поэтому экстремум энтропии достигается при $x \approx \gamma/(\gamma+1) = x_D$. Для дозвукового квадранта $M^2 \ll 1$, поэтому экстремум энтропии достигается при $x \approx 1/[(\gamma+1)M^2] = x_{df}$. Подчеркнем, что исходным для этих случаев является состояние в точке O и состояние продуктов по ходу реакции перемещается от точки начального состояния к своему экстремум (к точке D или F). Характер экстремума определяется знаком второй производной:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \hat{S}}{dx^2} &= \frac{\gamma^2 M^4}{[1 - \gamma M^2 (x - 1)]^2} - \frac{\gamma}{x^2} = \\ &= \frac{\gamma^2 M^4 x^2 - \gamma [1 - \gamma M^2 (x - 1)]^2}{x^2 [1 - \gamma M^2 (x - 1)]^2}. \end{aligned}$$

Для детонационного $(M^2 \gg 1)$ квадранта

$$\frac{d^2\hat{S}}{dx^2} \approx \gamma^2 M^4 [x^2 + (x-1)^2] > 0,$$

т. е. экстремум соответствует минимуму. Для дефлаграционного $({\rm M}^2 \ll 1)$ квадранта

$$\frac{d^2S}{dx^2} \approx -\frac{\gamma}{x^2} < 0,$$

что характеризует экстремум как максимум.

Следует особо отметить, что из состояния O в точку F система попадает однозначно в результате химической реакции, спускаясь вдоль дефлаграционной прямой Михельсона — Рэлея, с возрастанием температуры и снижением давления. Эти закономерности подтверждаются экспериментально. А вот в точку D система может попасть двумя путями: один из О вдоль детонационной прямой Михельсона — Рэлея с постепенным повышением температуры и давления, второй — из О сначала в точку В химпика, а уже из В вдоль этой же детонационной прямой Михельсона — Рэлея к точке D с повышением температуры и понижением давления. Для детонации изменение энтропии по первому пути может быть количественно оценено (что и было сделано авторами классических теорий), но данный путь не имеет ни единого экспериментального подтверждения. А вот экспериментальных подтверждений того, что в ДВ реакция «стартует» не из точки O, а из состояния B в химпике за головным скачком ДВ, предостаточно (речь об этом ниже).

Вдоль адиабаты Пуассона, проведенной через начальную точку $O, PV^{\gamma} = P_0 V_0^{\gamma}$ (или $yx^{\gamma} = 1 -$ «гипербола»), тогда $S - S_0 = \frac{R}{\gamma - 1} \ln 1 = 0.$

На ударной адиабате энтропия возрастает по сравнению с начальной за счет необратимости процесса:

$$\frac{S-S_0}{R} = \frac{1}{\gamma - 1} \ln(yx^{\gamma}) = \frac{1}{\gamma - 1} \ln\left[\frac{1 - \eta x}{x - \eta}x^{\gamma}\right].$$

При этом в начальной точке — точке O — ударная адиабата ($y = (1 - \eta x)/(x - \eta)$) и адиабата Пуассона ($y = 1/x^{\gamma}$) имеют касание третьего порядка. На адиабате энерговыделения энтропия также возрастает по сравнению с начальной.

Схема расположения прямой Михельсона — Рэлея 1, адиабаты энерговыделения 3 и линии постоянной энтропии 2 для случая, когда ДВ распространяется с минимальной скоростью относительно состояния *O*, изображена на рис. 3. В точке касания на детонационной ветви энтропия минимальна и возрастает



Рис. 3. Схема взаимного касания характерных линий при горении и детонации

по мере увеличения числа Маха, причем как для пересжатого участка, так и для недосжатого. Все точки детонационной ветви 3 лежат выше изоэнтропы 2, проведенной через точку касания.

На дефлаграционной ветви число Маха возрастает при переходе от нормального пламени к режимам трансформирования ламинарного горения в турбулентное и приближении к точке касания. Потому в точке касания энтропия будет иметь максимальное значение среди всех точек дефлаграционной ветви, т. е. для дефлаграционного горения адиабатой энерговыделения является кривая 2 на рис. 3, а изоэнтропой максимального значения — кривая 3. Другими словами, относительно исходного состояния в точке *O* изоэнтропа и адиабата энерговыделения процессов горения и детонации меняются местами в точках касания.

В классических моделях условие Q = constпозволяет относительно легко получить простые соотношения для основных газодинамических параметров детонации и дефлаграции. В настоящее время практически все существующие расчетные программы используют условие Q = Q(P,T) в предположении химического равновесия продуктов химической реакции. В табл. 1 представлены расчетные значения основного энтропийного множителя yx^{γ} для характерных режимов протекания реакции в реагирующих смесях водорода и типичных углеводородов с одинарными (метан), двойной (этилен) и тройной (ацетилен) химическими связями при смешении с кислородом и воздухом. Во втором столбце таблицы приведены характерные точки относительно начального состояния в точке O (см. рис. 1). Точки D_d и D_{df} соответствуют точкам касания для детонации и дефлаграционного горения (на рис. 1 это точки D_0 и F_0), точка P соответствует режиму сгорания при постоянном давлении (что практически совпадает с условиями нормального горения), точка V — режиму мгновенного взрыва в постоянном объеме, точка B — химпику ДВ.

Из табл. 1 видно, что относительно O энтропийный множитель yx^{γ} (последний столбец) в продуктах реакции минимален для детонационного процесса и максимален для дефлаграционного горения. Следует особо подчеркнуть, что формальная возможность режима с переходом из O вдоль прямой Михельсона — Рэлея в состояние детонации D_d снизу с нарастанием давления в экспериментах не наблюдалась.

ДЕТОНАЦИЯ КАК ГОРЕНИЕ В ПОТОКЕ. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Еще в [2] была высказана мысль о том, что детонацию можно формально представить как дефлаграцию относительно состояния за головным ударным фронтом ДВ. Такое представление вытекает из того, что точка В (так называемый пик Неймана ДВ) лежит на пересечении ударной адиабаты 2 и прямой Михельсона — Рэлея 3, исходящей из точки О (см. рис. 1). На рис. 1 при замене состояния О на состояние B (нижние индексы в обозначениях точек) дополнительно представлен квадрант, являющийся дефлаграционным относительно состояния в точке В. Детонационная точка относительно исходного состояния в О со сверхзвуковой скоростью D_O одновременно является дозвуковой дефлаграционной точкой F_B относительно состояния В. Отметим, что в стационарной волне нет запрета на формальный переход из О в В с повышением давления в ДВ или из В вниз с понижением давления в волне дефлаграционного горения, хотя состояние О и B сильно отличаются друг от друга.

В классических моделях энерговыделение считается не зависящим от давления и температуры: $Q = \text{const} \neq Q(P, T, V)$, хотя в настоящее время практически все расчеты параметров горения и детонации ведутся при физически оправданном предположении о химическом равновесии продуктов. В табл. 2 приведены расчетные координаты характерных точек

Смесь	Харак- терные точки	y	x	γ	yx^γ	Смесь	Харак- терные точки	y	x	γ	yx^γ
$2H_2 + O_2$	В	33	0.18	1.32	3.44		В	27.64	0.19	1.32	3
	D_d	18.79	0.54	1.22	8.93	H ₂ —air	D_d	15.58	0.55	1.17	7.79
	V	9.59	1	1.21	9.59		V	8	1	1.18	8
	P	1	8.35	1.2	12.66		Р	1	6.87	1.18	9.74
	D_{df}	0.49	16.07	1.19	13.23		D_{df}	0.48	13.09	1.2	10.38
	В	55.49	0.11	1.17	4.39		В	31.32	0.16	1.26	3.2
	D_d	29.32	0.54	1.21	13.88	CH ₄ —air	D_d	17.17	0.55	1.18	8.57
$CH_4 + 2O_2$	V	14.84	1	1.2	14.84		V	8.79	1	1.18	8.79
	P	1	12.7	1.19	20.41		P	1	7.52	1.19	10.99
	D_{df}	0.49	24.48	1.18	21.23		D_{df}	0.47	14.55	1.21	11.89
$C_2H_4 + 3O_2$	B	63.96	0.11	1.17	4.7	C ₂ H ₄ —air	B	33.48	0.16	1.26	3.32
	D_d	33.43	0.54	1.23	15.61		D_d	18.35	0.55	1.17	9.13
	V	16.87	1	1.22	16.87		V	9.38	1	1.17	9.38
	Р	1	14.25	1.21	24.73		Р	1	8.05	1.17	11.5
	D_{df}	0.48	27.96	1.2	26.08		D_{df}	0.48	15.43	1.18	12.16
	В	64.57	0.11	1.19	4.87	C ₂ H ₂ —air	В	34.76	0.16	1.27	3.42
	D_d	33.83	0.54	1.26	15.64		D_d	19.11	0.55	1.17	9.48
$\mathrm{C_{2}H_{2}}+2.5\mathrm{O_{2}}$	V	17.07	1	1.25	17.07		V	9.77	1	1.17	9.77
	Р	1	14.2	1.23	26.23		Р	1	8.4	1.16	11.78
	D_{df}	0.48	27.77	1.22	27.97		D_{df}	0.48	16.25	1.16	12.22

 x_i для различных кислородных и воздушных смесей и базовых режимов для двух состояний: O — исходная система, B — система с параметрами состояния за фронтом головной УВ детонационного фронта (пик Неймана).

Если *В* выбрать в качестве исходного состояния горючей смеси, тогда квадрант $P < P_B, V > V_B$ будет представлять область существования дефлаграционных процессов для этого состояния, а прямая Михельсона — Рэлея из точки *B*, идущая также через точку *O*, будет характеризовать максимальную скорость дефлаграционного горения. Отметим, что состояния *O* и *B* связаны законами сохранения массы и импульса (см. рис. 2):

$$\rho_0 D = \rho_2 (D - u_2) = \rho_B (D - u_B),$$

$$P_0 + \rho_0 D^2 = P_2 + \rho_2 (D - u_2)^2 = P_B + \rho_B (D - u_B)^2,$$

что дает $(P_B - P_0)/(V_B - V_0) = -\rho_0^2 D_0^2 = \text{const u}$ допускает выбор любого состояния (O или B) в качестве базового. Из рис. 1 можно сделать еще один важный вывод: скорость пламени при начальном состоянии O заметно меньше скорости пламени при повышенных давлениях и температурах в состоянии B, что хорошо видно из наклона прямых Михельсона — Рэлея 4 и 3, характеризующих процесс горения при состояниях O и B (больший наклон из B — линия 3).

Особенностью состояния в точке *В* является то, что в ней за УВ существует поток еще не прореагировавшей горючей смеси, поэтому фронт пламени относительно лабораторной системы координат будет распространяться по частицам движущегося газа, т. е. его скорость будет складываться из скорости пламени относительно частиц и скорости потока (такая скорость называется видимой скоростью пла-

Таблица 1

Смесь	Характерные точки	x_B	x_d	x_V	x_P	x_{df}
шо	0	0.18	0.54	1	8.33	16.13
$H_2 - O_2$	В			0.18	0.33	0.543
	0	0.186	0.56	1	6.67	13.16
H_2 —air	В			0.186	0.338	0.555
CII O	0	0.114	0.54	1	12.5	25
$CH_4 - O_2$	В			0.114	0.307	0.553
	0	0.163	0.55	1	7.69	14.46
CH ₄ —air	В			0.163	0.326	0.543
C II O	0	0.115	0.54	1	14.3	22.18
$C_2H_2 \rightarrow O_2$	В			0.115	0.31	0.544
СЦоіт	0	0.16	0.55	1	8.33	16.58
C_2H_2 —air	В			0.16	0.32	0.55
	0	0.107	0.54	1	14.3	21.06
$O_2H_4 - O_2$	В		_	0.107	0.305	0.54
си и с	0	0.159	0.55	1	8.33	15.6
C_2H_4 —air	В			0.159	0.325	0.552

Таблица	2	
---------	----------	--

мени). Заметим, что поскольку основными физическими механизмами распространения пламени считаются теплопроводность и диффузия, то скорости фронта горения всегда должны быть дозвуковыми. К сожалению, в научной литературе последних лет видимой скорости фронта горения некоторыми авторами неправомерно приписывается смысл классической скорости пламени и приводятся завышенные (в том числе — сверхзвуковые) значения этой величины, что является подменой классических понятий.

При распространении ДВ по неподвижной смеси

$$w_0 = D_d, w = D_d - u_d$$

и из закона сохранения массы получаем

$$u_d = D_d (1 - x_d^*) = D_d \left(1 - \frac{1 + \gamma M_d^2}{(\gamma + 1) M_d^2} \right) = D_d \frac{M_d^2 - 1}{(\gamma + 1) M_d^2} \approx \frac{D_d}{\gamma + 1},$$

u_d — скорость продуктов детонации относительно неподвижной системы отсчета. Одновременно скорость звука в продуктах

$$c_d = D - u_d \approx [\gamma/(\gamma + 1)] D \approx \gamma u_d > u_d,$$

т. е. поток продуктов детонации является дозвуковым.

А вот поток в химпике (в точке B) при детонационных (гиперзвуковых) числах Маха будет сверхзвуковым относительно лабораторной системы координат:

$$u_N = D_d (1 - x_N^*) = D_d \left(1 - \frac{(\gamma - 1)M_d^2 + 2}{(\gamma + 1)M_d^2} \right) =$$
$$= D_d \frac{2(M_d^2 - 1)}{(\gamma + 1)M_d^2} \approx \frac{2D_d}{\gamma + 1},$$

поэтому начавшаяся химическая реакция будет тормозить сверхзвуковой поток и его скорость будет уменьшаться (в трубе постоянного сечения подводимое тепло разгоняет дозвуковой поток и тормозит сверхзвуковой! [5]). Но при этом выделяющееся тепло химической реакции будет повышать температуру смеси и увеличивать скорость звука, т. е. уменьшающаяся скорость потока и возрастающая скорость звука должны сближаться. Однако переход от сверхзвукового потока на дозвуковой возможен только при изменении воздействия, т. е. когда подвод тепла заменяется его отводом. Следует подчеркнуть, что с формальной точки зрения при аррениусовской экспоненциальной зависимости скорости химической реакции от температуры реакция может завершиться лишь асимптотически через бесконечно большое время. При этом скорость потока должна максимально сблизиться со скоростью звука, что должно завершиться достижением критической скорости истечения. В классической модели Михельсона — Чепмена — Жуге звуковая поверхность w = c в плоскости окончания химической реакции постулируется (она называется плоскостью Чепмена -Жуге). В рамках идеализированных моделей смысл плоскости Чепмена — Жуге заключается в том, что она не пропускает слабые возмущения к фронту волны, делая стационарной зону от ударного фронта до звуковой плоскости. К этой плоскости можно «пристыковать» нестационарные решения в виде акустических волн разрежения или сжатия, которые не будут влиять на зону реакции.

Как отмечено выше, адиабата Гюгонио при Q = const является гиперболой в системе координат (P, V) с точкой O исходного состояния. Система координат с точкой B в качестве исходной получается путем параллельного переноса точки O в точку B (y' = y + a, x' = x + b), что не меняет характер адиабаты Гюгонио как гиперболы.

Проведем анализ уравнения адиабаты Гюгонио в системе координат (X, Y) с исходным состоянием смеси в точке O при переходе в систему координат (X', Y') с исходным состоянием в точке B. По аналогии с системой (X, Y)введем безразмерные переменные $y' = P/P_B$ и $x' = V/V_B$. Адиабата Гюгонио (X, Y) выразится через новые переменные следующим образом:

$$y = y' \frac{P_B}{P_0} = \frac{1 - \eta x' V_B / V_0 + 2\eta \gamma q}{x' V_B / V_0 - \eta},$$

откуда уже в системе (X', Y') —

$$y' = \frac{1 - \eta x' V_B / V_0 + 2\eta \gamma q}{(x' V_B / V_0 - \eta) (P_B / P_0)}.$$

Здесь $\frac{P_B}{P_0} = \frac{2\gamma M_0^2 - (\gamma - 1)}{(\gamma + 1)}$ и $\frac{V_B}{V_0} = \frac{(\gamma - 1)M_0^2 + 2}{(\gamma + 1)M_0^2}$, а М₀ — число Маха ДВ в си-

стеме (X, Y) с точкой начального состояния смеси О. Видно, что адиабата энерговыделения в координатах (X', Y') осталась гиперболой, но деформировалась из-за появления постоянных множителей P_B/P_0 и V_B/V_0 . Особо подчеркнем, что при переходе из одной системы в другую это не влияет на точку касания прямой Михельсона — Рэлея с адиабатой энерговыделения. Точка касания характеризует детонационный процесс относительно О и дефлаграционный процесс относительно В. Координаты точек касания определяются при совместном решении двух уравнений — для прямой Михельсона — Рэлея и адиабаты энерговыделения. В табл. 3 представлены результаты равновесных расчетов параметров горения и детонации для ряда типичных смесей. Три первые строки характеризуют последовательно дефлаграционную точку F, детонационную точку Dи точку В химпика при исходном состоянии в точке О. Три последующие строки характеризуют аналогичные параметры при выборе исходного состояния в точке B (в химпике ДВ).

Видно, что удельное энерговыделение смеси Q_q при детонации из исходного состояния в точке О и при дефлаграции из исходного состояния в точке В одинаковы для различных смесей, что ожидаемо в силу того, что сжатие в головном фронте ДВ осуществляется в предположении неизменности исходного состава смеси, т. е. ударно-волновой переход без химической реакции. Реакция начинается и идет позже. Одинаковость Q_q приводит к одинаковости химического состава продуктов и скоростей звука. Сказанное подтверждает представление детонации исходной горючей смеси как дефлаграцию (горение) в сверхзвуковом потоке (столбцы u_2 и c_2) в химпике за головным ударным фронтом ДВ.

Проанализируем вопрос об энтропии системы с точки зрения выбора начального состояния. Воспользуемся уравнением энергии (адиабата энерговыделения) в виде

$$U - (U_0 + Q) = (w_0^2 - w^2)/2 + P_0 V_0 - PV =$$

$$= (P + P_0)(V_0 - V)/2.$$

Смесь	Харак- терные точки	<i>D</i> , м/с	<i>u</i> , м/с	<i>с</i> , м/с	Q_g , кал/с	<i>u</i> ₂ , м/с	<i>c</i> ₂ , м/с	M_d
H ₂ —O ₂	F_O	84	-1258	1 342	1 891			
	Do	2837	1294	1543	1580			5.283
	В					2 328	1 268	
	F_B	508	-1034	1542	1580			
	D_B	2748	1045	1703	1 242			2.168
	В					1 891	1 602	
	F_O	71	-872	943	777			
	Do	1 969	878	1 0 9 1	673			4.819
II sin	В					1 602	896	
H_2 —air	F_B	366	-726	1 0 9 1	673			
	D_B	1 941	729	1 212	537			2.167
	В					1 331	1 1 3 9	
	F_O	45	-1065	1 1 1 0	1 348			_
	D _O	2 390	1 101	1 289	1 1 4 1			6.731
CII O	В			_		2119	826	
$CH_4 - O_2$	F_B	271	-1018	1 289	1 1 4 1			
	D_B	2492	1 0 3 2	1 460	888			3.016
	В					2 0 6 1	1065	
	Fo	53	-800	860	643			
	D_O	1 803	805	998	559			5.089
CIT .	В					1509	759	
Un ₄ —air	F_B	294	-704	998	559			
	D_B	1 827	707	1 1 1 9	440			2.406
	В					1351	970	
	F_O	40	-1063	1 103	1 200			
	D_O	2 4 2 4	1 108	1 316	973			7.342
C II O	В					2146	851	
$U_2 \Pi_2 - U_2$	F_B	278	-1038	1316	973			
	D_B	2590	1056	1534	691			3.043
	В			_		2 107	1 1 6 0	

Таблица 3 (начало)

Смесь	Харак- терные точки	<i>D</i> , м/с	<i>u</i> , м/с	<i>с</i> , м/с	Q_g , кал/с	<i>u</i> ₂ , м/с	<i>c</i> ₂ , м/с	M_d
a u	F_O	54	-828	883	722			
	D_O	1 866	840	1 0 2 6	588			5.378
	В					1566	784	
C_2H_2 —air	F_B	300	-726	1 0 2 6	588			
	D_B	1 890	731	1159	443			2.412
	В					1387	1019	
	F_O	39	-1051	1 0 9 1	1255			
	Do	2374	1 0 9 2	1 282	1 048			7.236
	В					2 1 2 0	798	
C_2H_4 — O_2	F_B	254	-1028	1 282	1 047			
	D_B	2517	1 0 4 6	1 472	788			3.154
	В			_		2100	1056	
C ₂ H ₄ —air	F_O	56	-811	867	678			
	Do	1824	819	1 005	570			5.260
	В			_		1533	761	
	F_B	291	-714	1 005	570			
	D_B	1 849	718	1 1 3 1	436			2.431
	В			_		1370	980	

Таблица 3 (окончание)

В дифференциальной форме с учетом первого начала термодинамики оно выглядит следующим образом:

$$dU = (V_0 - V)/2 \cdot dP - (P + P_0)/2 \cdot dV =$$
$$= T \cdot dS - P \cdot dV,$$

отсюда

$$T \cdot dS = (P - P_0)/2 \cdot dV - (V - V_0)/2 \cdot dP.$$

Уравнение прямой Михельсона — Рэлея

$$(P - P_0)(V - V_0) = -\rho_0^2 w^2 = \text{const}$$

поэтому в точках касания прямой Михельсона — Рэлея и адиабаты энерговыделения из последнего соотношения получается $T \cdot dS = 0$ и энтропия системы достигает экстремумов (как в детонационной точке, так и в дефлаграционной). Значения энтропии в точках касания характеризуют свои индивидуальные изоэнтропы (линии S = const или $PV^{\gamma} = \text{const}$) для детонации и дефлаграции, а в силу свойства экстремальности эти изоэнтропы также оказываются касательными как к прямым Михельсона — Рэлея, так и к адиабате Гюгонио. Характер экстремума энтропии определяется второй производной вышеприведенного выражения для адиабаты Гюгонио $2T \frac{dS}{dV} = (P - P_0) - (V - V_0) \frac{dP}{dV}$. Имеем $2T \frac{d^2S}{dV^2} = -(V - V_0) \frac{d^2P}{dV^2}$. Поскольку адиабата Гюгонио является гиперболой, то $\frac{d^2P}{dV^2} > 0$, тогда $\frac{d^2S}{dV^2} > 0$ при $V < V_0$ (детонационная точка с минимумом энтропии при касании изоэнтропы снизу от адиабаты Гюгонио) и $\frac{d^2S}{dV^2} < 0$ при $V > V_0$ (дефлаграционная точка с максимумом энтропии, когда изоэнтропа касается адиабаты Гюгонио сверху). Таким образом, при изменении состояния системы от исходного в точке O на состояние в химпике B детонационной волны меняется не

только уравнение адиабаты Гюгонио, но и характер экстремума изоэнтропы (минимум заменяется на максимум) и, соответственно, меняется взаимное расположение адиабаты Гюгонио и изоэнтропы. С учетом предварительного изменения состояния О в В последующая химическая реакция завершается одинаковым итогом — стремлением энтропии системы к максимальному значению, в полном соответствии со вторым началом термодинамики. Этот результат можно считать доказательством того, что детонацию можно действительно рассматривать как горение в потоке горючей смеси, а саму детонационную смесь — как систему, подвергшуюся двукратному необратимому превращению, сначала за счет воздействия головного ударного фронта, а затем за счет химической реакции сгорания смеси.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показано, что предсказываемое классическими идеализированными моделями минимальное возрастание энтропии горючей смеси при детонации по сравнению с максимальным ее возрастанием при дефлаграции связано с учетом лишь возрастания энтропии при необратимой химической реакции смеси, а возрастание энтропии при необратимом переходе исходной смеси в состояние пика Неймана за головной ударной волной детонационного фронта не учитывалось. Учет двухстадийного возрастания энтропии для детонации (необратимый переход при ударно-волновом сжатии смеси с последующим необратимым химическим превращением исходной смеси в продукты детонации) позволяет устранить предсказываемое классическими моделями противоречие о характере изменения энтропии при необратимом детонационном процессе.

Учет промежуточного перехода смеси из начального состояния в состояние в пике Неймана детонационной волны позволяет считать доказанным предсказание К. И. Щелкиным возможности рассмотрения детонации как горения в сверхзвуковом потоке горючей смеси.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. **Физика** взрыва: в 2 т. / под ред. Л. П. Орленко. — М.: Физматлит, 2002.
- 2. Щелкин К. И., Трошин Я. К. Газодинамика горения. М.: Изд-во АН СССР, 1963.
- 3. Бартльме Ф. Газодинамика горения. М.: Энергоиздат, 1981.
- 4. Бажин Н. М., Иванченко В. А., Пармон В. Н. Термодинамика для химиков. — М.: Химия, КолосС, 2004.
- 5. Станюкович К. П. Неустановившиеся движения сплошной среды. — М.: Наука, ГРФМЛит, 1971.

Поступила в редакцию 09.09.2021. После доработки 25.11.2021. Принята к публикации 12.01.2022.