

- 3 N.S. Darova, O.A. Dibirov, G.V. Zharova, A.A. Shanin, Yu.V. Yanilkin. EGAK code system. Lagrangian-Eulerian techniques for 2D gas dynamic multicomponent fluid flows // VANT, Ser.: Math. Model. Phys. Process., Issue 2, 1994, pp.51-58.
- 4 Roudenko V., Chabourov M., and Tchekhounov E. Virtual physics laboratory of the package MASTER. Proc. International Conference 'Physics Teacher Education beyond 2000', Barcelona, 2000.
- 5 Б.Г. Лобойко, С.Н. Любятинский. Зоны реакции детонирующих твёрдых взрывчатых веществ // ФГВ, т. 36, №6, 2000. с. 45-64.
- 6 И.В. Кузьмицкий. Детонация как фазовый переход от ВВ к ПВ // Ударные волны в конденсированных средах. 2008. С-Петербург. Россия. С. 265-271. Труды XI Харитоновские тематические научные чтения. РФЯЦ-ВНИИЭФ. Саров. 2009. С. 33-39.
- 7 И.В. Кузьмицкий. Критерии детонации как фазового перехода для стационарных режимов Чепмена-Жуге на основе теоремы Гленсдорфа-Пригожина и волна разрежения // Shock Waves in Condensed Matter. St. Petersburg-Novgorod, Russia. 2010. pp. 38-42. Труды XIII Харитоновские тематические научные чтения. РФЯЦ-ВНИИЭФ. Саров. 2011. С. 76-82.

КИНЕТИКА, ОПИСЫВАЮЩАЯ НЕКЛАССИЧЕСКИЕ РЕЖИМЫ ДЕТОНАЦИИ

А.П. Ершов, Д.А. Медведев

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия

Считается, что детонация конденсированных ВВ происходит, как правило, в режиме Зельдовича–Неймана–Деринга (ЗНД). На этом основаны большинство методик изучения кинетики реакции. В последнее время чаще всего измеряется профиль скорости границы раздела ВВ и инертного окна, на которое выходит детонационная волна. Далее оценивается время реакции по длительности пика фон Неймана, при более детальных подходах ищется кинетика, наиболее близко воспроизводящая наблюдаемые профили в газодинамическом расчете. Задав вид кинетического уравнения, подбирают его параметры, сравнивая расчет с экспериментом. Обычно скорость реакции ищется как функция текущих параметров среды (давления, плотности, степени превращения λ ...), причем сразу после прохождения ударного фронта $\lambda = 0$.

Однако в ряде случаев не наблюдались ожидаемые в режиме ЗНД пики. При этом, разумеется, нет возможности извлечь из эксперимента кинетику, основанную на модели ЗНД. В работах [1, 2] не удалось зарегистрировать химпик при высокой плотности ВВ. Это возможно при весьма быстрой реакции, если пик укладывается в пределы экспериментального разрешения (около 5 нс). В [3] наблюдалось качественное изменение структуры волны (с нарастанием давления). Отметим, что в [4, 5] в условиях, аналогичных [1,3] («агатирированные» ВВ) получен химпик. Такие расхождения могут указывать на важную роль процедуры приготовления заряда, которая определяет, в частности, структуру вещества. В работах А.В. Уткина и др. (см. [5,6] и другие публикации тех же авторов) в большом числе случаев наблюдались количественные отклонения от режима ЗНД, в частности, крайне малая

амплитуда пиков Неймана. Кроме того, зарегистрированы и качественные отличия, а именно отсутствие пиков, а также профили с ростом давления за скачком.

Редукцию или исчезновение химпика естественно объяснить частичной реакцией во фронте волны (ширина которого в гетерогенных ВВ порядка размера структурной неоднородности). В ряде применяемых кинетик участвует быстрая реакция в узкой зоне близи фронта [2] или скачок состава во фронте [7, 8]. Однако одного этого эффекта недостаточно для трактовки инвертированных профилей (например, в TNETB в диапазоне пористости от 3,3 до 12,5%). Согласно [6], в этом интервале осуществляется недосжатый режим детонации, что подтверждается и заметным увеличением скорости волны.

В данной работе построена качественная модель кинетики, позволяющая воспроизвести описанные выше особенности в рамках единого подхода.

Известен эффект ускорения реакции в окрестности фронта ударной волны из-за неравновесности [9]. В.С. Трофимовым [10] предложено обобщение кинетики: в кинетическое уравнение явно вводится лагранжева скорость деформации dV/dt (t – время, V – удельный объем вещества) или дивергенция массовой скорости $\text{div } \mathbf{u}$. Такой член будет существенным в областях с большими градиентами, а сам подход формально аналогичен учету дифференциальных слагаемых при введении вязких сил. Однако в специальных экспериментах вклад производной в кинетику не обнаружился. Неудача могла быть связана с неудачным выбором формы кинетики (предполагалось, что вклад скорости деформации квадратичен по dV/dt). В [11] показано, что в указанных экспериментах дифференциальное слагаемое кинетики, если оно вообще было важным, могло быть только линейным, а в [12] продемонстрированы физические процессы, способные давать линейный по dV/dt вклад в кинетику.

Ниже излагаются результаты исследования динамики детонации при кинетике вида

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{1-\lambda}{\tau} - b \frac{1-\lambda}{V_0} \frac{dV}{dt} \quad (1)$$

Здесь τ – характерное время реакции, V_0 – начальный удельный объем, b – безразмерный коэффициент, регулирующий вклад быстрой реакции во фронте волны; положительный знак его соответствует ускорению реакции при сжатии. В частности, при прохождении ударного фронта при $b > 0$ достигается конечное превращение: по существу, в пределах фронта согласно (1) интегрируется дельта-функция. Простейшая макрокинетика (1) позволила получить как уменьшение амплитуды химпика, так и смоделировать режимы с ростом давления за фронтом.

Решалась одномерная нестационарная задача развития стационарной детонационной волны из начального возмущения (мгновенное выгорание в тонком слое вблизи жесткой стенки). Выбрана классическая схема Рихтмайера–Мортонна, в которой фронты волн рассчитываются сквозным образом, для чего на волнах сжатия вводится искусственная вязкость, причем размазывание фронта волны сжатия не зависит от амплитуды волны.

Немонотонность схемы несущественна при кинетике вида (1), в которой нет явной зависимости скорости реакции от термодинамических параметров состояния. Из соображений простоты выбрано уравнение состояния идеального газа

$$E = \frac{PV}{\gamma - 1} - \lambda Q, \quad (2)$$

где E – внутренняя энергия, P – давление. При показателе адиабаты $\gamma = 2,7$, $V_0 = 1 \text{ см}^3/\text{г}$, начальном давлении $P_0 = 1 \text{ ГПа}$ и теплоте реакции $Q = 4 \text{ кДж/г}$ достигаются параметры детонации, характерные для типичных ВВ. Считалось, что реакция начинается при росте давления на 3% сверх начального.

Контрольный расчет с традиционной кинетикой (при $b = 0$ и $\tau = 30 \text{ нс}$) при длине заряда 50 мм воспроизвел ожидаемое состояние Чепмена–Жуге, скорость детонации D_j (7.456 км/с) и классическую структуру волны. Давление в пике превышало давление в точке Жуге примерно в 1,9 раза (29,6 и 15.3 ГПа соответственно).

При включении зависимости от скорости деформации реакция частично проходит в области размазанного фронта волны. Например, при $b = 3$ во фронте достигается степень превращения около 70%. При этом уменьшается амплитуда химпика (до 22,8 ГПа, т.е. в 1.5 раза выше давления Жуге). Однако состояние Чепмена–Жуге по-прежнему достигается, и течение в сопровождающей зону реакции волне Тейлора практически не изменяется по сравнению с контрольным вариантом. На рис. 1 изображена структура волн при значениях $b = 0, 3$ и 11.

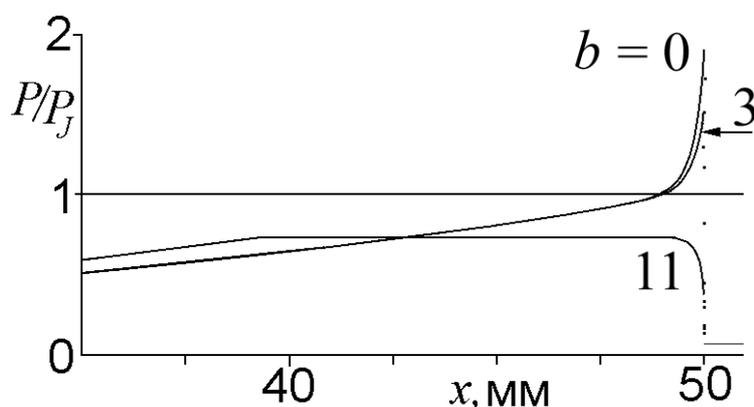


Рис. 1. Профили давления в зависимости от вклада скорости деформации в кинетику.

Ожидалось, что с увеличением b степень превращения во фронте будет расти, а химпик будет сглаживаться. Такое поведение действительно наблюдается при умеренных значениях b . Однако оказалось, что при достаточно больших b качественно меняется режим детонации. Вместо волны с химпиком код формировал недосжатую детонационную волну, имевшую завышенную скорость, профиль с ростом давления в ходе реакции и «полочку» постоянных параметров, примыкающую к зоне реакции (рис. 1, профиль «11», скорость $D = 8,035 \text{ км/с}$). Причина такой перестройки состоит в изменении динамических свойств реагирующей среды.

Появление «лишней» производной в уравнении (1) ведет к модификации скорости малых коротковолновых возмущений [11]: место обычной термодинамической скорости звука $c = \sqrt{\gamma PV}$ для выбранных зависимостей (1,2) занимает величина

$$c_E = \sqrt{\gamma PV + (\gamma - 1)bQ(1 - \lambda)/V_0}. \quad (3)$$

Поскольку $c_E > c$, при росте b возможен случай, когда c_E превзойдет скорость идеальной детонации D_J . При этом волна Чепмена–Жуге становится неустойчивой, поскольку возмущения из зоны реакции способны ее обгонять. Эти возмущения и формируют теперь фронт волны. Можно показать, что в рамках сделанных выше предположений критическое значение b равно 7,777.

Сказанное иллюстрируется фазовыми диаграммами процесса, показанными на рис. 2 для вариантов $b = 3$ и $b = 11$. Стрелки указывают направление эволюции из начального состояния (P_0, V_0) . Область сжатия во фронте волны показана пунктиром, соединяющим расчетные точки.

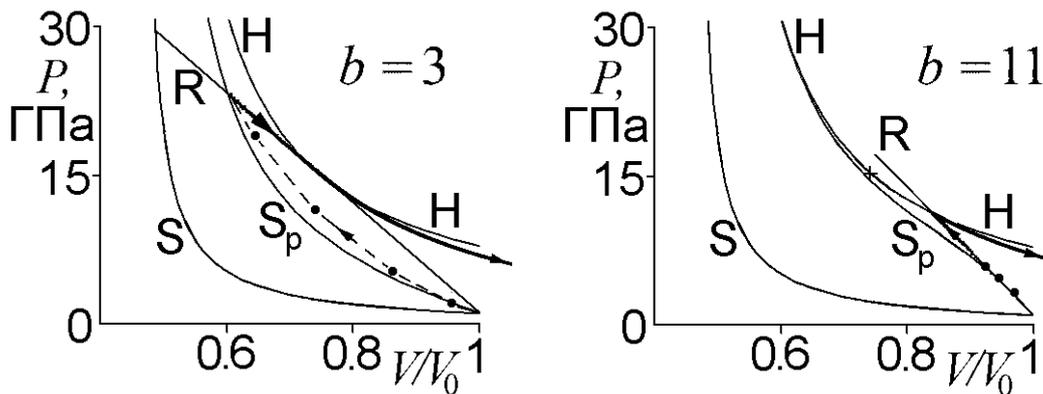


Рис. 2. $P - V$ диаграммы при умеренном и большом значениях b .

При $b > 0$ изображающая точка из-за реакции во фронте не достигает замороженной ударной адиабаты S , а оказывается после прохождения фронта в точке пересечения линии Релея R и адиабаты частичного реагирования S_p , на которой степень превращения соответствует зависимости (1):

$$P = \frac{2(\gamma - 1)Q(1 - \exp(-b(1 - V/V_0))) + P_0((\gamma + 1)V_0 - (\gamma - 1)V)}{(\gamma + 1)V - (\gamma - 1)V_0}. \quad (4)$$

Вначале фазовая траектория касательна к S_p . Начальный наклон S_p больше наклона S , в соответствии с различием термодинамической замороженной скорости звука c и скорости распространения возмущений c_E при учете дифференциальных механизмов реакции. При умеренном значении b наклон S_p меньше наклона касательной к адиабате Гюгонио H . Эта касательная и служит в таком случае линией Релея, по которой фазовая траектория спускается

в точку Жуге, а далее следует по адиабате Пуассона, исходящей из этой точки, что соответствует примыкающей волне Тейлора.

Однако для больших b линия S_p приближается к H (за исключением окрестности $V = V_0$), и растет начальный наклон S_p . Соответственно фазовая траектория следует прямой R , проходящей выше точки Жуге, и достигает нижней ветви адиабаты Гюгонио. Осуществляется недосжатый режим, в котором течение в зоне реакции сверхзвуковое, от чего и образуется «полочка» за зоной реакции.

В расчетах моделировался также выход волны на границу с инертным материалом. Полученные «истории» массовой скорости границы (аналогичные записям приборов типа VISAR) содержали экспоненциально затухающий со временем вклад. Анализ этих данных показал, что характерные времена, извлеченные из профилей скорости, заметно отличаются от заданного времени реакции $\tau = 30$ нс. При $b = 3$ «скоростное» время равно 86 нс, а при $b = 11$ получено 16 нс. Причина этого состоит в различном знаке вклада дифференциальной кинетики в области, примыкающей к фронту: в нормальном режиме она замедляет реакцию за фронтом, а в недосжатом – ускоряет.

Поведение модели полностью соответствует толкованию экспериментальных результатов А.В. Уткина и др. [5,6], предложенному авторами этих работ. Качественное согласие расчетов с опытом можно рассматривать как дополнительное обоснование анализа, проведенного экспериментаторами. Можно надеяться, что при учете реальных свойств среды включение дифференциальной кинетики позволит получить и количественное совпадение. Таким образом, открывается перспектива определения макрокинетики из данных опытов типа VISAR с учетом конечного реагирования во фронте, в том числе для явно неклассических недосжатых режимов.

В недосжатых режимах скорость распространения волны не фиксирована термодинамическими условиями, а зависит от кинетики. При детонации в пористой среде естественным кандидатом на роль быстрого переносчика реакции являются мезоскопические течения. Фронт волны в пористой структуре – это сложный неоднородный комплекс, в пределах которого распространение реакции возможно не только за счет разогрева, вызванного сжатием, но и за счет неоднородностей типа опережающих основной фронт микроструй. Опережающее распространение микроструй наблюдалось, например, в [13]. По-видимому, их эффективность для распространения фронта в большинстве случаев недостаточна (что и позволяет говорить о «нормальной» детонации). Тем не менее эксперименты [5,6] показывают, что при выполнении специальных условий, таких как достаточная чувствительность ВВ к подобным агентам распространения, концентрация зародышей будущих очагов, определенная дисперсность и структура порового пространства, осуществление недосжатых режимов возможно. Видимо, из-за необходимости сочетания ряда условий недосжатые волны наблюдались не во всех ВВ (наиболее яркий пример – TNETB) и в довольно узких диапазонах

параметров. В наших расчетах недосжатые режимы возникали при достаточно больших значениях безразмерного управляющего параметра ($b \sim 10$) и, следовательно, тоже являются некоторой экзотикой. Напротив, режимы со скоростью Чепмена–Жуге, но с редуцированным химпиком вполне типичны.

Разумеется, предложенную модель, особенно в части описания струйных процессов, пока следует рассматривать как предварительную. Впрочем, некоторые соображения, позволяющие связать струи с дифференциальной кинетикой, предложены в [11,12]. Сжатие вещества увеличивает относительную скорость сталкивающихся микрообъемов и тем самым ускоряет реакцию. Кроме того, сжатие увеличивает и нормальную скорость горения в «горячих точках».

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 12-03-00077), а также Программы Президиума РАН №2 (проект №7).

ЛИТЕРАТУРА

1. Лобойко Б.Г., Любятинский С.Н. Зоны реакции детонирующих взрывчатых веществ // Физ. горения и взрыва. 2000. Т. 36, №6. С. 45-64.
2. Tarver C.M., Breithaupt R.D., Kury J.W. Detonation waves in pentaerythritol tetranitrate // Journal of Applied Physics. 1997. V. 81, N11. P. 7193-7202.
3. Ашаев В.К., Доронин Г.С., Левин А.Д. О структуре детонационного фронта в конденсированных ВВ // Физ. горения и взрыва. 1988. Т. 24, №1. С. 95-99.
4. Fedorov A.V. Detonation wave structure in liquid homogeneous, solid heterogeneous and agatized HE // Proc. of 12th International Detonation Symposium. San Diego, CA, 2005. P. 230-233.
5. Уткин А.В., Колесников С.А., Першин С.В. Влияние начальной плотности на структуру детонационных волн в гетерогенных взрывчатых веществах // Физ. горения и взрыва. 2002. Т. 38, № 5. С. 111-118.
6. Kolesnikov S.A., Utkin A.V., Ananin A.V. Non-classical steady-state detonation regimes in TNETB // Proc. of 13th International Detonation Symposium. Norfolk, VA, 2006. P. 422-426.
7. Klimentko V.Yu. Multiprocess model of detonation (version 3) // Shock Compression of Condensed Matter–1995. AIP Conf. Proc. 370. Part 2. Seattle, WA, 1995. P. 361-364.
8. Карпенко И.И., Корепова Н.В. Численное моделирование критического диаметра стационарной детонации конденсированных взрывчатых веществ // Химическая физика. 2005. Т. 24, № 10. С. 31-37.
9. Dremine A.N., Klimentko V.Yu. et al. Multiprocess detonation model // Proc. of 9th International Detonation Symposium. Portland, OR, 1989. P. 725-728.
10. Трофимов В.С., Трофимова Г.П. О возможности разложения литого ТНТ в ударном скачке // Физ. горения и взрыва. 1980. Т. 16, №2. С. 92-99.
11. Ершов А.П. О макрокинетики быстрых реакций // Физ. горения и взрыва. 2010. Т. 46, №6. С. 49-59.
12. Ершов А.П., Медведев Д.А. О кинетике химических реакций при детонации // Письма в Журнал технической физики. 2009. Т. 35, вып. 3. С. 60-66.
13. Федоров А.В. Параметры пика Неймана и структура фронта детонационной волны конденсированных взрывчатых веществ // Химическая физика. 2005. Т. 24, №10. С. 13--21.