

УДК 662.215.1

РЕЖИМЫ ДЕТОНАЦИИ ТВЕРДЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ ПРИ НЕКЛАССИЧЕСКОЙ БЫСТРОЙ КИНЕТИКЕ

А. П. Ершов

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

Численно исследовано развитие детонации в системе с кинетикой экзотермической реакции, включающей зависимость от скорости изменения удельного объема. При резком сжатии вещества, например, во фронте ударной волны, такая кинетика приводит к конечным изменениям степени превращения. При существенном вкладе таких быстрых процессов получены режимы детонации, отличные от стандартного режима Зельдовича — Неймана — Дёринга. Профили волн качественно совпадают с полученными для некоторых взрывчатых веществ в экспериментах А. В. Уткина и др. Результаты моделирования подтверждают важность учета реакции во фронте волны.

Ключевые слова: макрокинетика, взрывчатые вещества, структура зоны реакции, неидеальная детонация, недосжатая детонация.

ВВЕДЕНИЕ

Как известно, детонация конденсированных взрывчатых веществ (ВВ) в большинстве случаев происходит в режиме Зельдовича — Неймана — Дёринга (ЗНД). На этом основано большинство методик изучения кинетики реакции. В простейших случаях оценивается время реакции по длительности пика фон Неймана, при более детальных подходах подбирается кинетика, наиболее близко описывающая наблюдаемые в эксперименте профили. В последнее время чаще всего измеряется профиль скорости границы раздела ВВ и окна, на которое выходит детонационная волна.

В ряде случаев, однако, не наблюдались ожидаемые в режиме ЗНД пики. При этом, разумеется, нет возможности извлечь из эксперимента кинетику, основанную на модели ЗНД. В некоторых экспериментах получены заметно уменьшенные по амплитуде (редуцированные) пики. В таких случаях требуются дополнительные меры по согласованию кинетики с экспериментом. Все подобные режимы мы далее будем называть неклассическими, в отличие от «чистых» режимов ЗНД.

В работах [1, 2] не удалось зарегистрировать химпик при высокой плотности ВВ. В

принципе, это возможно и в рамках ЗНД при весьма быстрой реакции, если пик укладывается в пределы экспериментального разрешения (≈ 5 нс). В [3] наблюдалось качественное изменение структуры волны с плавным нарастанием давления. Отметим, что в [4] в условиях, аналогичных [1, 3] («агатированные» ВВ, т. е. прессованные до высокой плотности с добавлением ацетона), получен химпик. Такие расхождения могут указывать на важную роль процедуры приготовления заряда, которая определяет, в частности, структуру вещества. Наиболее представительный набор данных, включающих явно неклассические случаи, представлен в работах [5–14]. Исследован ряд ВВ в широком диапазоне начальных плотностей при различной начальной дисперсности. Измерялась скорость движения границы фольги, примыкающей к торцу заряда ВВ, при выходе волны в прозрачный материал «окна» (вода или LiF). Поскольку исследовались неоднородные пористые материалы, приходилось использовать фольги значительной толщины (сотни микрометров), которые позволяли записывать профиль скорости в течение $150 \div 200$ нс. Такой подход позволил наблюдать качественные изменения структуры зоны реакции в зависимости от начальной плотности при сохранении прочих условий опытов. В [12–14] убедительно продемонстрировано отсутствие существенных искажений сигнала в фольгах. В большом числе случаев наблюдались количественные от-

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 12-03-00077) и научной программы Президиума РАН № 2 (проект № 7).

клонения от режима ЗНД, в частности, крайне малая амплитуда пиков Неймана. Кроме того, зарегистрированы и качественные отличия, а именно форма профилей с ростом массовой скорости (а значит, давления) за скачком.

Такие резко неклассические профили получены для гексогена, октогена, TNETB и ZOХ при высоких плотностях начиная от 1.73, 1.84, 1.56 и 1.71 г/см³ соответственно. Прессование гексогена до плотностей 1.50 ÷ 1.74 г/см³ проводилось с добавлением небольшого количества ацетона (до 1 %). Более высокие плотности (до 1.776 г/см³) достигались агатированием с 10 % ацетона, причем в таких зарядах наблюдался химпик. Авторы [7, 9] ожидали, что химпик в агатированном гексогене должен исчезнуть при более высоких плотностях: 1.78 ÷ 1.79 г/см³, которых удалось достигнуть в работах [1, 3].

В наиболее подробно изученном TNETB обнаружен интервал начальной плотности 1.56 ÷ 1.77 г/см³ (84.8 ÷ 96.2 % кристаллической плотности), в котором вместо химпика наблюдается постепенный подъем скорости границы раздела [11–14]. Для ряда ВВ показана важная роль начальной дисперсности. В мелкодисперсном (5 мкм) TNETB переход к неклассическому режиму происходил уже при плотности около 1.3 г/см³. В гексогене той же дисперсности неклассический режим реализовался в небольшой окрестности плотности 1.3 г/см³ [10]. Все эти наблюдения указывают на важную роль структуры ВВ, которая определяется начальной дисперсностью и процедурой приготовления заряда, а не только плотностью прессования. Хотя режимы без химпика первоначально связывались с почти однородными агатированными зарядами, более подробный анализ указывает на предпочтительность гетерогенности для их осуществления.

Авторы [5–14] объясняют свои результаты отклонениями от классического режима ЗНД. В гетерогенных ВВ ширина области сжатия во фронте детонационной волны порядка характерного размера пор и, следовательно, является макроскопической величиной. В пределах этой области ВВ может частично реагировать. Это приводит к уменьшению или при значительном выгорании во фронте к исчезновению пиков Неймана. Случаи, когда вместо химпика происходит постепенное нарастание параметров, трактуются как недосжатые режимы. Те же процессы, которые приводят к

реакции во фронте, обеспечивают диссипацию. Известно, что диссипативные механизмы могут приводить к редуцированию химпика и к формированию недосжатых волн [15]. Характерный признак недосжатости — превышение волновой скорости над термодинамической скоростью Чепмена — Жуге — наблюдался в [11, 12].

Таким образом, существование неклассических режимов представляется достоверным. Это ставит проблему извлечения кинетики из данных эксперимента. Разумеется, традиционные подходы, основанные на модели ЗНД, неприменимы в таких ситуациях. Учет реагирования в узкой зоне в пределах фронта [16] или учет скачка степени превращения на фронте [17, 18] могут улучшить описание режимов с редуцированным химпиком, но не пригодны для случаев с растущими параметрами.

В [19, 20] нами рассматривалась кинетика, допускающая конечное выгорание во фронте волны. Эти работы развивают идею В. С. Трофимова [21–23] о явном учете в кинетическом уравнении лагранжевой скорости изменения удельного объема $\partial V/\partial t$. Формально такой подход аналогичен учету дифференциальных слагаемых при введении вязких сил. В [20] продемонстрировано, что кинетика с явным вхождением производной «справляется» с режимами, в которых пик Неймана слабо выражен. Подробно исследована структура стационарной волны. Однако более экзотические случаи с ростом параметров за фронтом не рассматривались.

В данной работе решается нестационарная задача о формировании детонационной волны из начального возмущения. На модельном примере показано, что дифференциальная кинетика вида [20], при надлежащем учете диссипации, способна породить не только модифицированные режимы Чепмена — Жуге, но и недосжатые режимы. Тем самым достигается полное качественное описание неклассических детонационных волн, обнаруженных экспериментаторами.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Одномерное течение с химическими реакциями описывается следующей системой уравнений:

$$\frac{\partial V}{\partial t} - V_0 \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t} + V_0 \frac{\partial p}{\partial x} = 0. \quad (1)$$

Здесь t — время, x — лагранжева координата, u — скорость течения, V — удельный объем вещества, V_0 — начальный удельный объем (постоянный для однородного образца), p — давление. Уравнение энергии имеет вид

$$\frac{\partial E}{\partial t} + p \frac{\partial V}{\partial t} = 0. \quad (2)$$

Далее необходимо уравнение состояния вида $E = E(p, V, \lambda)$, где степень превращения λ описывает химические реакции. Будем считать, что λ меняется от нуля в исходном состоянии до 1 в конечном равновесном состоянии. Имея в виду рассмотрение задачи на простейшем примере, ограничимся идеализированным выражением

$$E = \frac{pV}{\gamma - 1} - \lambda Q, \quad (3)$$

где показатель адиабаты γ и тепловой эффект Q — константы.

Система замыкается кинетическим уравнением, которое запишем в виде [20]

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \frac{1 - \lambda}{\tau} - b \frac{1 - \lambda}{V_0} \frac{\partial V}{\partial t}, \quad (4)$$

где τ — характерное время реакции. В (4) вклад неклассической дифференциальной кинетики регулируется безразмерным коэффициентом b . Положительный знак b соответствует ускорению реакции при сжатии (в частности, конечному превращению при прохождении ударного фронта).

При быстром по сравнению со временем τ сжатии от V_0 до V , пренебрегая алгебраическим слагаемым, получим из (4) значение λ :

$$\lambda = 1 - \exp(-b(1 - V/V_0)). \quad (5)$$

Физические процессы, ответственные за реакцию (закрытие пор, образование микрокумулятивных струй и т. п.), можно рассматривать как соударение микрообъемов вещества, приводящее к возникновению очагов реакции. Если эти соударения происходят на фоне общего сжатия среды ($\partial V/\partial t < 0$), то дополнительное сближение элементов структуры способно заметно ускорить реакцию, что и отражает дифференциальный член в (4). Отметим, что линейное по $\partial V/\partial t$ уравнение, сходное с (4), а также аналог (5) используются в реально применяемой кинетике Морозова — Карпенко [18] для описания конечного выгорания при формировании очагов на ударном фронте.

Поскольку нас интересуют волновые процессы, в которых реакция «включается» при сжатии, принималось, что уравнение (4) выполняется, когда давление в данной лагранжевой точке возрастает выше заданного порога p_i на фоне начального значения p_0 . Варьирование p_i в диапазоне $(1.01 \div 1.1)p_0$ не оказывало существенного влияния на результаты. Приведенные ниже расчеты выполнены при $p_i = 1.03p_0$. При включении реакции в каждой новой точке одновременно задавалась степень превращения в соответствии с (5).

Расчетная область состоит из двух частей. Зона $0 < x < 50$ мм занята ВВ. К правому торцу заряда примыкает инертный оконный материал толщиной 12.5 мм. Указанные размеры в общем соответствуют геометрии реальных опытов. Левая ($x = 0$) и правая ($x = 62.5$ мм) границы считаются жесткими стенками ($u = 0$). При $t = 0$ на всем интервале задана нулевая скорость. Давление равно p_0 всюду, кроме малого отрезка, примыкающего к левой границе (область иницирования). В этой малой области назначалось полное выгорание при постоянном объеме ($\lambda = 1$, с соответствующим значением давления). Обратим внимание, что кинетика (4) не зависит от термодинамических параметров (p, V), чем устраняются возможные осложнения при нестационарном взаимодействии зоны реакции с волной, отраженной от материала окна.

Как и в [20], приняты значения констант $V_0 = 1$ см³/г, $\gamma = 2.7$, $Q = 4$ кДж/г. Начальное давление $p_0 = 1$ ГПа. При таком выборе основные параметры волны по порядку величины близки к реальным для конденсированных ВВ: скорость детонации $D_J = 7.456$ км/с, давление Чепмена — Жуге $p_J = 15.294$ ГПа, удельный объем в состоянии Жуге $V_J = 0.7429$ см³/г. Оконный материал имел такую же начальную плотность и такое же уравнение состояния, но считался инертным. Характерное время реакции τ принято равным 30 нс, что также недалеко от результатов реальных экспериментов.

Появление производной в правой части кинетического уравнения (4) меняет динамические свойства реагирующей среды. В частности, модифицируется скорость малых коротковолновых возмущений [20]: место обычной термодинамической скорости звука $c = \sqrt{\gamma p V}$ для выбранных зависимостей (3), (4) занимает величина

$$c_E = \sqrt{\gamma p V + \frac{(\gamma - 1)bQ(1 - \lambda)V}{V_0}}. \quad (6)$$

Отметим, что при полном выгорании ($\lambda = 1$) обращается в нуль не только алгебраическое слагаемое в (4), но и вклад производной. Этим достигается согласование зоны реакции с сопровождающей ее волной Тейлора. Везде в этой волне, а также в конце зоны реакции $c_E = c$. Поэтому термодинамическая скорость Чепмена — Жуге будет той же самой, что и в модели ЗНД (при $b = 0$).

2. ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ

Для решения нестационарной задачи выбрана классическая схема Рихтмайера — Мортон [24]. В этой схеме фронты волн рассчитываются сквозным образом, для чего на волнах сжатия вводится искусственная вязкость. В уравнениях (1), (2) к термодинамическому давлению добавляются вязкие напряжения q :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + V_0 \frac{\partial(p + q)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial t} + (p + q) \frac{\partial V}{\partial t} = 0. \quad (7)$$

При этом в тех областях течения, где вещество сжимается ($\partial u / \partial x < 0$),

$$q = \frac{Ah^2}{V} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2,$$

иначе $q = 0$. Здесь h — размер расчетной ячейки, A — безразмерный коэффициент. Как показано в [24], определенная таким образом вязкость обеспечивает «размазывание» фронта волны сжатия, не зависящее от амплитуды волны. Именно это свойство представляется желательным для моделирования волн в гетерогенных материалах, в которых характерная ширина фронта волны определяется структурой заряда. Коэффициент вязкости A варьировался в пределах $4 \div 16$, без существенного влияния на результаты. Поскольку данная работа развивает невязкую постановку [20], интерес представляли течения с малой вязкостью, и основные расчеты выполнены при $A = 8$. При этом фронт скачка «размазывался» приблизительно на 4 расчетные ячейки. Шаг по времени определялся из условия Куранта, в которое входила истинная скорость малых возмущений c_E . Поскольку в расчете возникают сильные ударные волны, число Куранта назначалось равным 0.3 (т. е. формальное условие устойчивости выполнялось с запасом).

Для нашей задачи введение квадратичной вязкости имеет более глубокий смысл, чем это традиционно принято считать. В расчетной газодинамике эта вязкость по праву называется искусственной и обычно она преувеличена («размазывает» разрывы гораздо сильнее, чем реальные механизмы диссипации). Напротив, в гетерогенном пористом веществе это не просто средство организации сквозного счета, а вполне актуальная характеристика действительных процессов. Диссипация во фронте волны сжатия в пористом веществе связана с теми же столкновениями микрообъемов вещества, которые приводят к быстрой реакции. Разумеется, не следует ожидать буквального воспроизведения структуры скачка в реальной среде, но качественно искусственная вязкость «работает» в правильном направлении и может быть включена в модель с не меньшими основаниями, чем модификация кинетики (4). В основной серии расчетов размер ячейки составлял $1/160$ мм, так что толщина скачка была около 25 мкм. За характерное время реакции τ волна перемещалась на ≈ 35 ячеек.

В классических исследованиях структуры ударных волн в газе [25, 26] показано, что учет молекулярных механизмов диссипации позволяет разрешить структуру ударных волн. Характерная ширина слабой волны обратно пропорциональна ее амплитуде. Для сильных волн, как известно, ширина скачка порядка длины свободного пробега, причем стандартные линейные выражения для вязких напряжений уже неприменимы. В пористом веществе аналог длины свободного пробега — характерный размер пор. При амплитудах волн, представляющих интерес, именно этот размер определяет ширину зоны перехода от исходного к сжатому состоянию. Поэтому применение квадратичной вязкости вида (7) представляется не только удобным, но и отражающим суть дела.

Введение сквозного алгоритма расчета делает процесс эволюционным. Развитие волны из начального возмущения происходит естественным образом. Ниже показано, что в расчетах автоматически получаются как «нормальные», так и недосжатые режимы детонации (чего трудно ожидать, например, от алгоритмов, использующих явное выделение фронта ударной волны). Следует отметить, что алгоритм [24] не является монотонным и на фронте волны наблюдаются небольшие колебания.

Однако для нашей простейшей кинетики, не включающей зависимостей активационного характера, этот недостаток не имеет большого значения.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Вначале естественно рассмотреть случай $b = 0$, когда вклад неклассической дифференциальной кинетики отсутствует. На рис. 1, *a* слева показан профиль давления p (здесь и далее профили демонстрируются в зависимости от эйлеровой координаты r) в момент времени, соответствующий выходу фронта волны на границу заряда и оконного материала, а также зависимость скорости волны D от координаты фронта волны. Справа более подробно показаны профили давления, числа Маха течения M в системе фронта волны и степени превращения λ в окрестности фронта. Видно, что сформировалась детонационная волна с четко выделенным химпиком и точкой Чепмена — Жуге (при $p = p_J$ достигается значение $M = 1$), за которыми следует автомодельная волна Тейлора и далее — область постоянных параметров. Скорость волны достаточно быстро выходит на идеальное значение D_J (расчетное значение скорости 7.471 км/с, отличие от D_J на 0.2 %).

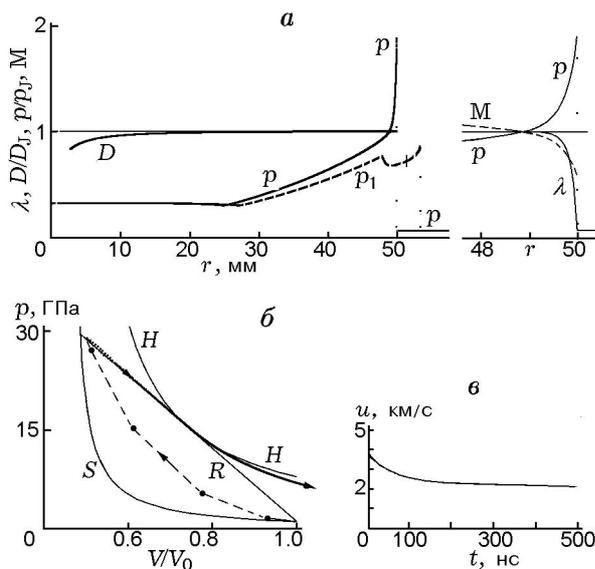


Рис. 1. Результаты расчета варианта с классической кинетикой ($b = 0$):

a — распределения параметров, *b* — фазовая диаграмма, *в* — запись скорости границы раздела (время отсчитывается от момента выхода волны на границу)

На рис. 1, *b* показана p - V -диаграмма состояния в волне в тот же момент времени. Фазовая траектория стартует из точки (p_0, V_0) , в которой касается ударной адиабаты S . Далее изображающая точка движется вверх, оставаясь между S и линией Рэля — Михельсона R , как и следует ожидать для участка, на котором существенно диссипация. Эта часть траектории обозначена штриховой линией, соединяющей расчетные точки. Траектория немного не достигает точки верхнего пересечения S и R из-за частичной реакции во фронте волны. В данном случае причина небольшого превращения во фронте — не дифференциальный механизм (поскольку он отключен), а конечная ширина фронта, определяемая диссипацией. Далее по мере выгорания траектория следует по линии R до точки касания с адиабатой Гюгонио H , а затем опускается ниже H по адиабате Пуассона из состояния Чепмена — Жуге. Слабый разброс точек вблизи максимума давления, вызванный немонотонностью расчетной схемы, в масштабе рисунка практически незаметен.

Распределение давления через 0.6 мкс после выхода волны на границу раздела показано на рис. 1, *a* штриховой кривой p_1 . В инертное вещество идет ударная волна, в реагирующее — волна разрежения. Вертикальная черта на графике показывает положение границы раздела на этот момент. На рис. 1, *в* приведена расчетная запись скорости границы, которая имитирует результаты опытов с использованием VISAR. На ней можно качественно отличить начальный участок с примерно экспоненциальным спадом скорости в соответствии с кинетикой (4) при $b = 0$ и последующий линейный участок, отражающий волну Тейлора. Оценка времени реакции, проведенная подгонкой функции $u(t) = F + Gt + H \exp(-t/T)$, дала значение $T = 67.3$ нс, т. е. такая оценка «растягивает» истинное время реакции τ примерно вдвое.

Для выяснения причин такого отклонения была проведена специальная обработка расчетных данных. Строились профили λ и p в зависимости от лагранжевой координаты x (отмеряемой от фронта) в момент выхода волны на границу раздела. Эти профили, подобно зависимостям $u(t)$ выше, аппроксимировались функцией $p(x) = p_1 \exp(-x/p_2) + p_3 + p_4 x$ либо $\lambda(x) = L_0 - L_1 \exp(-x/L_2)$. При этом первые четыре точки, соответствующие «размазанному» скачку, отбрасывались. Совпадение рас-

четных точек и аппроксимирующей функции было практически идеальным. Далее извлекалось характерное время изменения каждой величины из соотношений $L_2 = D\tau_\lambda$ и $p_2 = D\tau_p$, справедливых в силу достижения волной стационарной стадии. Использование лагранжевой координаты позволяет следить за процессами в частице вещества, исключая деформационные искажения.

Для степени превращения характерное время τ_λ воспроизвелось с высокой точностью (обработка дала 29.993 нс), однако время τ_p оказалось примерно вдвое большим (59.3 нс). Различие времен хорошо видно и на рис. 1, а: давление достигает значения p_J заметно позже, чем степень превращения визуально вырастает до 1. Причину такого различия иллюстрирует рис. 1, б. Поскольку фазовые точки следуют линии Рэлея, касательной к детонационной адиабате в точке Жуге, малые отклонения давления вблизи этой точки ($p - p_J$) имеют меньший порядок малости, чем отклонения степени превращения, а именно $(p - p_J) \propto \sqrt{1 - \lambda}$. При экспоненциальном стремлении к точке Жуге характерное время τ_p должно быть вдвое больше τ_λ . Отметим, что характерные времена изменения удельного объема и массовой скорости в зоне реакции совпадают с τ_p в силу линейной связи этих величин с давлением в стационарной зоне реакции.

Совпадения времени T , определенного из зависимости $u(t)$, с истинным временем реакции τ ожидать и не следовало. Время T оказывается ближе к τ_p (что естественно), но отличается и от него, поскольку переход волны в инертное вещество — существенно нестационарный и нелинейный газодинамический процесс. Рассмотренный пример показывает, насколько важно четко указывать процедуру, определяющую кинетические характеристики из опытов. Сколько-нибудь определенные результаты может дать только прямой подбор кинетики, воспроизводящей зависимости $u(t)$ или профили $p(x)$ либо $u(x)$ в полном газодинамическом расчете процесса. К сожалению, такое полное исследование проводится не часто, и многие экспериментаторы ограничиваются грубыми оценками, например, указывая время достижения состояния Жуге (в этом примере 160 нс), что частично объясняет значительный разброс литературных данных.

Включение дифференциальной кинетики приводит к резкому увеличению степени реа-

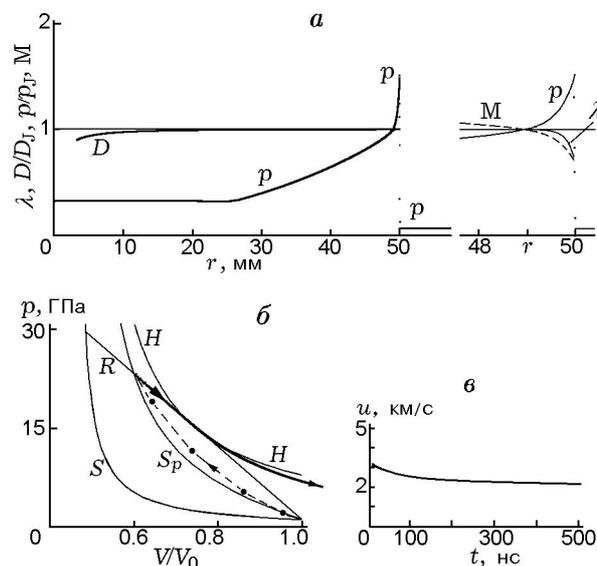


Рис. 2. Результаты расчета варианта с редуцированным химпином. Неклассическая кинетика (4) при $b = 3$:

а — распределения параметров, б — фазовая диаграмма, в — запись скорости границы

гирования во фронте волны. На рис. 2 изображены результаты расчета варианта кинетики при $b = 3$, в котором степень превращения во фронте достигает 0.7. Действительно, на профиле λ заметен скачок такой величины, «размазанный» на несколько ячеек. Химпик заметно уменьшился.

На фазовой диаграмме точки, изображающие фронт волны, поднимаются в место пересечения R не с замороженной адиабатой S , а с адиабатой частичного реагирования S_p , на которой степень превращения конечна и соответствует зависимости (5). Уравнение для S_p имеет вид

$$p = [2(\gamma - 1)Q(1 - \exp(-b(1 - V/V_0))) + p_0((\gamma + 1)V_0 - (\gamma - 1)V)] / [(\gamma + 1)V - (\gamma - 1)V_0]. \quad (8)$$

Начальный наклон S_p больше наклона S в соответствии с различием термодинамической замороженной скорости звука $c = \sqrt{\gamma p V}$ и скорости распространения возмущений c_E при учете дифференциальных механизмов реакции (6). В окрестности начальной точки фазовая траектория касается S_p . Сравнение рис. 1 и 2 показывает, что частичная реакция во фронте волны привела к менее выраженному химпику, но

состояние Чепмена — Жуге по-прежнему достигается, как и термодинамическая скорость детонации.

Оценка характерного времени реакции по гладкой части профиля $\lambda(x)$ дала значение $\tau_\lambda = 33.6$ нс. Время $\tau_p = 68.4$ нс, как и в варианте с $b = 0$, оказалось примерно вдвое больше. Для зависимости $u(t)$ (рис. 2, в) характерное время $T = 83.2$ нс. Увеличение этих времен по сравнению с предыдущим вариантом расчета вызвано некоторым затягиванием реакции вне зоны фронта. После начального сжатия во фронте вещество в зоне реакции расширяется, и дифференциальное слагаемое в правой части (4) уменьшает скорость превращения. Как следует из рис. 2, б, удельный объем в плавной части зоны реакции возрастает приблизительно на $\Delta V = 0.14$ см³/г. Предполагая, что изменение объема происходит с характерным временем τ_p , из (4) можно оценить влияние эффекта расширения на кинетику:

$$\frac{1}{\tau_\lambda} = \frac{1}{\tau} \left(1 - b \frac{\Delta V}{V_0} \frac{\tau}{\tau_p} \right),$$

откуда при $\tau_p = 68.4$ нс и $b = 3$ рост τ_λ составляет примерно 23 % по сравнению с вариантом $b = 0$, что по порядку величины соответствует увеличению, полученному в расчете.

С увеличением вклада дифференциального слагаемого в кинетику (4) адиабата частичного превращения S_p приближается к равновесной адиабате H . При этом неизбежно растет начальный наклон S_p . Нетрудно показать, что наклон S_p сравнивается с наклоном касательной к H , проведенной из начальной точки, при

$$b_* = (\gamma + 1) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{2\gamma p_0 V_0}{(\gamma^2 - 1)Q}} \right) = 7.778.$$

Естественно ожидать, что при больших значениях b ситуация качественно изменится. Именно, при $b > b_*$ скорость малых возмущений c_E начинает превышать скорость идеальной детонации D_J . При этом волна Чепмена — Жуге становится неустойчивой, поскольку возмущения из зоны реакции способны ее обгонять. Эти возмущения и будут теперь формировать фронт волны.

На рис. 3 показаны результаты для варианта с $b = 11$, т. е. при значительном вкладе дифференциальной кинетики. Волна весьма быстро выходит на недосжатый режим со

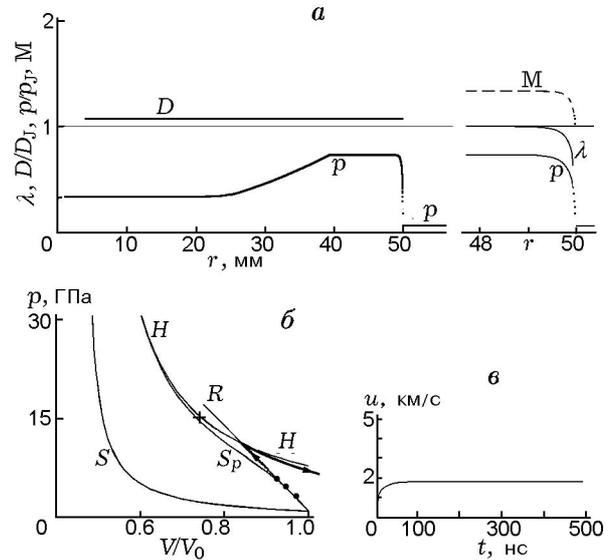


Рис. 3. Результаты расчета недосжатой детонации. Неклассическая кинетика (4) при $b = 11$: а — распределения параметров, б — фазовая диаграмма, в — запись скорости границы

скоростью фронта 8.035 км/с (превышающей скорость Чепмена — Жуге на 579 м/с). На фронте волны после начального резкого подъема вместо химпика наблюдается постепенный рост давления. За участком роста видна «полочка», причем максимальное давление ниже, чем в режиме Чепмена — Жуге.

Фазовые точки на диаграмме рис. 3, б из начального состояния поднимаются вверх по лучу R , практически касающемуся адиабаты частичного превращения S_p в точке (p_0, V_0) . Из-за того, что наклон S_p заметно больше, чем наклон прямой, касательной к адиабате Гюгенио H в точке Жуге (обозначена крестиком), состояние Чепмена — Жуге оказывается недостижимым. Вместо этого фазовая траектория достигает H на ее слабой ветви, и по окончании интервала, в котором параметры постоянны, опускается по адиабате Пуассона. На записи скорости границы после начального резкого подъема наблюдается плавный рост, за которым следует участок постоянной скорости. Сгущение точек при подъеме происходит постепенно, так что на фронте трудно выделить явный скачок.

Таким образом, рис. 3 демонстрирует основные классические признаки недосжатого режима детонации [27]. Отметим, что такие режимы не рассматривались в [20], поскольку в этой работе пренебрегалось толщиной фрон-

та скачков. Для получения недосжатой детонации необходимо полное рассмотрение эволюции волны из начального возмущения с разрешением структуры фронтов сжатия.

Характерное время τ_λ для этого варианта 18.2 нс, время $\tau_p = 22.1$ нс, время подъема зависимости $u(t)$ равно 15.6 нс. Все эти времена заметно меньше времени τ . Это отклонение — результат положительного вклада дифференциального члена в кинетике (4) в зоне плавного роста плотности за фронтом. Оценка, аналогичная проведенной выше, дала уменьшение τ_λ примерно до 0.44τ , что по порядку величины согласуется с расчетом. В этом варианте правило $\tau_p \approx 2\tau_\lambda$ не выполняется, так как линия R уже не касательна к H .

Поскольку недосжатый режим в принципе может быть реализован за счет диссипации [15], представляет интерес выяснение относительной роли фактора сжатия и фактора вязкости в нашей задаче. Для этого были проведены расчеты при значениях коэффициента вязкости $A = 8 \div 128$ (что соответствует ширине скачка от 4 до 16 ячеек или, при данном размере ячейки, от 25 до 100 мкм). Обнаружено, что зависимость скорости установившегося режима от вязкости слабая — от 0.913 до 1.038 от теоретической «невязкой» скорости $D_i = 8.803$ км/с, соответствующей касанию линии R и кривой S_p при $b = 11$ ($D_i = c_E$ в момент начала реакции). Причина отклонения, по-видимому, связана с влиянием как вязкости, так и условия воспламенения. В расчетах непрерывно отслеживалась p - V -диаграмма процесса, на которой первая фазовая точка на фронте волны время от времени оказывалась не на линии R или S_p , а на стандартной адиабате S , если давление в этой точке не достигало p_i . Разумеется, в таких случаях нарушается аппроксимация идеального режима [20] и следует ожидать некоторого уменьшения средней скорости волны. Увеличение p_i до 1.1 понижает скорость волны на ≈ 4.3 %, а снижение p_i до 1.01 — повышает ее примерно на ту же величину. Превышение D_i при высокой вязкости можно связать с прямым эффектом диссипации, как в [15], поскольку при $A = 128$ теоретическая ширина фронта сжатия становится сравнимой с характерной шириной зоны реакции в плавном течении ($D\tau_\lambda \approx 200$ мкм). С этими оговорками приведенные выше результаты при $A = 8$ удовлетворительно соответствуют невязкому пределу. Недосжатый режим порождается в основ-

ном не диссипацией, а изменением динамических свойств среды из-за включения в кинетику объемной скорости сжатия. Роль вязкости в данной работе сводится к «размазыванию» скачков, внутри которых определяется, на какую часть детонационной адиабаты попадет реагирующая частица.

Отдельно остановимся на вопросе о существовании звуковой точки в недосжатой волне. Волну можно представить как наложение последовательности малых возмущений, первое из которых имеет скорость D_i относительно неподвижного вещества, а последующие движутся с текущими скоростями c_E относительно вещества, уже приведенного в движение. В идеальной постановке, при $p_i \rightarrow 1$, стартовое значение M в зоне реакции должно равняться 1 в силу равенства $D_i = c_E(p_0, V_0, \lambda = 1)$. Далее с ходом реакции число Маха M растет, как видно из рис. 3, а. Поэтому, за вычетом одной точки, все течение за фронтом сверхзвуковое ($M > 1$). Перед фронтом, пока нет реакции, скорость звука мала (здесь следует применять не c_E , а $c = \sqrt{\gamma p_0 V_0} = 1.643$ км/с), и перед волной также $M > 1$. Поэтому в идеальной ситуации происходит не переход через звуковую точку, а скачок на линию $M = 1$ сверху и отражение от этой линии также в область $M > 1$. Этим ситуация отличается от классического случая, рассмотренного в [27], когда скорость волны навязана внешним источником инициирования и все течение строго сверхзвуковое. В реальном расчете, показанном на рис. 3, скорость волны несколько меньше D_i , что уже обсуждалось выше. Однако из-за дискретизации первое расчетное значение за фронтом оказывается несколько больше 1, и, таким образом, кривая M на рис. 3 качественно верно отображает структуру волны.

Переход к недосжатым режимам в расчетах возникал при $b = 8.75$, что несколько больше теоретического значения 7.778. Это небольшое различие также связано с потерей аппроксимации из-за резких градиентов во фронте волны.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Поведение модели полностью соответствует толкованию экспериментальных результатов [5–14], предложенному авторами этих работ, с тем отличием, что различные режимы получаются за счет неклассической кинетики.

Качественное согласие расчетов с опытом можно рассматривать как дополнительное обоснование анализа, проведенного экспериментаторами. Отметим, что в рамках единой модели переходы между различными режимами достигаются изменением единственного управляющего параметра b .

Альтернативное объяснение [28] основано на предположении о пересечении при некоторой достаточно высокой начальной плотности ударной и детонационной адиабат ВВ. Не вдаваясь в детали концепции [28], укажем, что в этой работе рассматривается вариант одного пересечения, тогда как найденные позднее случаи, когда неклассический профиль наблюдается внутри некоторого интервала начальных плотностей, требуют двукратного пересечения адиабат. Для таких ситуаций объяснение [28] выглядит искусственным. Согласно более поздним данным [10–13], для осуществления неклассических режимов важна главным образом структура вещества, а плотность прессования влияет косвенно, поскольку от нее зависит структура. Профили с ростом давления получены, в том числе, и при весьма низких плотностях. Следовательно, основной фактор, приводящий к осуществлению неклассических режимов, имеет кинетическую природу, а не термодинамическую, как предлагается в [28].

Следует отметить близкое сходство расчетных записей скорости (полученных для простейшей, весьма грубой постановки) и данных [5–14]. Можно ожидать, что при учете реальных свойств среды включение дифференциальной кинетики позволит получить и количественное совпадение. Таким образом, открывается возможность определения макрокинетики из данных опытов типа VISAR с учетом конечного реагирования во фронте, в том числе для явно неклассических недосжатых режимов. При этом следует иметь в виду, что оценки времени реакции «на глаз» по записям скорости могут в несколько раз отличаться от истинного значения. Как показано выше, такие отклонения обычны даже при отсутствии прямого влияния изменения параметров в зоне реакции на ее ход. Поэтому кинетику следует извлекать, сравнивая экспериментальные кривые с расчетными.

В недосжатых режимах скорость распространения волны уже не фиксирована термодинамическими условиями, а зависит от кинетики.

Как отмечалось еще в [27], высокоскоростные недосжатые волны в принципе могли бы распространяться за счет опережающего переноса электронов или квантов света. Препятствует этому практическое обстоятельство — незначительность доли энергии, которая в типичных условиях «химической» детонации передается этим быстрым возбуждающим агентами. Однако при росте энерговыделения перенос излучением может стать основным [29].

Аналогично при детонации в пористой среде естественным кандидатом на роль быстрого переносчика 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 не вызывает сомнения (см., например, [30]). Как следует из опыта, их эффективность для распространения фронта в большинстве случаев недостаточна (что и позволяет говорить о «нормальной» детонации). Тем не менее эксперименты [5–14] показывают, что при выполнении специальных условий, таких как достаточная чувствительность ВВ к подобным агентам распространения, концентрация зародышей будущих очагов, определенные дисперсность и структура порового пространства, возможно осуществление недосжатых режимов. Видимо, из-за необходимости сочетания ряда условий недосжатые волны наблюдались не во всех ВВ (наиболее яркий пример — ТНЕТВ) и в довольно узких диапазонах параметров. Отметим, что в наших расчетах недосжатые режимы возникали при достаточно больших значениях безразмерного управляющего параметра ($b \approx 10$) и, следовательно, тоже являются некоторой экзотикой. Напротив, режимы со скоростью Чепмена — Жуге, но с редуцированным химиком вполне типичны.

В описанной выше модели «размазанный» в расчете фронт волны следует понимать как грубое осредненное представление реального неоднородного фронта, учитывающее также и микроструи. Хотя формально во всех расчетах условие включения реакции было одинаковым, но при больших значениях b (т. е. значительном вкладе реакции во фронте) эволюция состояния в волне идет по другому пути из-за того, что скорость распространения возмущения

ний в реагирующей среде становится больше термодинамической скорости волны D_J . Можно сказать, что таким образом моделируется вещество с достаточно высокой чувствительностью к микроструям.

Следует ожидать, что роль струй должна быть минимальной в наиболее плотных ВВ, в частности в агатированных. В [1, 2] в плотных ВВ не удалось зафиксировать химпик, что может быть следствием весьма быстрой реакции, происходящей в пределах экспериментального разрешения. В [4], однако, сообщается о нормальном химпике в агатированном октогене. Явное нарастание параметров в агатированных гексогене и октогене наблюдалось в [3]. Таким образом, экспериментальная информация в этой части противоречива и вопрос требует дальнейшего исследования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лобойко Б. Г., Любягинский С. Н. Зоны реакции детонирующих твердых взрывчатых веществ // Физика 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 // J. Appl. Phys. — 1997. — V. 81, N 11. — P. 7193–7202.
3. Ашаев В. К., Доронин Г. С., Левин А. Д. О структуре детонационного фронта в конденсированных ВВ // Физика горения и взрыва. — 1988. — Т. 24, № 1. — С. 95–99.
4. Fedorov A. V. Detonation wave structure in liquid homogeneous, solid heterogeneous and agitated HE // Proc. of 12th Intern. Detonation Symp., San Diego, CA, 2005. — P. 230–233.
5. Уткин А. В. Влияние начальной плотности на структуру детонационных волн в гетерогенных ВВ // Химическая физика процессов горения и взрыва: 12-й Симпозиум по горению и взрыву. — Черногоровка: ИПХФ РАН, 2000. — Ч. II. — С. 168–170.
6. Уткин А. В., Першин С. В., Фортвов В. Е. Изменение структуры детонационной волны в 2',2',2'-тринитроэтил-4,4,4-тринитробутирате с ростом начальной плотности // Докл. АН. — 2000. — Т. 374, № 4. — С. 486–488.
7. Уткин А. В., Колесников С. А., Фортвов В. Е. Структура стационарной детонационной волны в прессованном гексогене // Докл. АН. — 2001. — Т. 381, № 6. — С. 760–762.
8. Utkin A. V., Kolesnikov S. A., Pershin S. V., Fortov V. E. Influence of initial density on the reaction zone for steady-state detonation of high explosives // Proc. of 12th Intern. Detonation Symp., San Diego, CA, 2002. — P. 175–182.
9. Уткин А. В., Колесников С. А., Першин С. В. Влияние начальной плотности на структуру детонационных волн в гетерогенных взрывчатых веществах // Физика горения и взрыва. — 2002. — Т. 38, № 5. — С. 111–118.
10. Kolesnikov S. A., Utkin A. V., Ananin A. V., Pershin S. V., Fortov V. E. Reaction zone of steady-state detonation waves in dinitrodiazapentane and RDX // Proc. Shock Compression of Condensed Matter — 2003, Portland, OR. — AIP Conf. Proc. 706. — P. 851–854.
11. Уткин А. В., Ананьин А. В., Колесников С. А., Першин С. В. Структура детонационных волн в индивидуальных и смесевых прессованных ВВ // Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны (VII Харитоновские тематические научные чтения: тр. междунар. конф.). — Саров, РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2005. — С. 10–14.
12. Kolesnikov S. A., Utkin A. V., Ananin A. V. Non-classical steady-state detonation regimes in TNETB // Proc. of 13th Intern. Detonation Symp., Norfolk, VA, 2006. — ONR 351-07-01. — P. 422–426.
13. Utkin A. V., Mochalova V. M., Ananin A. V. Reaction zone structure for pressed HE and mixtures of high explosives with additions // Ibid. — P. 415–421.
14. Мочалова В. М., Уткин А. В., Ананьин А. В. Влияние дисперсности на структуру детонационной волны в прессованном TNETB // Физика горения и взрыва. — 2007. — Т. 43, № 5. — С. 90–95.
15. Вильямс Ф. А. Теория горения. — М.: Наука, 1971.
16. Lee E. L., Tarver C. M. Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives // Phys. Fluids. — 1980. — V. 23. — P. 2362–2371.
17. Klimenko V. Yu. Multiprocess model of detonation (version 3) // Shock Compression of Condensed Matter — 1995 / S. C. Schmidt, W. C. Tao (Eds). — AIP Conf. Proc. 370. Pt 2. — P. 361–364.
18. Морозов В. Г., Карпенко И. И. и др. Теоретическое обоснование феноменологической модели ударно-волновой чувствительности гетерогенного ВВ на основе ТАТБ с учетом одно- и двукратного ударно-волнового нагружения, в том числе с промежуточной разгрузкой // Хим. физика. — 1995. — Т. 14, № 2–3. — С. 32–39.
19. Ершов А. П., Медведев Д. А. О кинетике химических реакций при детонации // Письма в журн. техн. физики. — 2009. — Т. 35, № 3. — С. 60–66.
20. Ершов А. П. О макрокинетики быстрых реакций // Физика горения и взрыва. — 2010. — Т. 46, № 6. — С. 49–59.
21. Трофимов В. С. О возможности ускорения реакции и диффузии в ударном фронте детонации // Детонация. Критические явления.

- Физико-химические превращения в ударных волнах. — Черногловка, ОИХФ, 1978. — С. 11–16.
22. **Трофимов В. С., Трофимова Г. П.** О возможности разложения литого ТНТ в ударном скачке // Физика горения и взрыва. — 1980. — Т. 16, № 2. — С. 92–99.
 23. **Воробьев А. А., Трофимов В. С., Михайлюк К. М., Королев А. Н., Брауэр Г. Б.** Исследование инициирования детонации в литом тротиле динамическим методом. I. Постановка задачи и методика эксперимента // Физика горения и взрыва. — 1985. — Т. 21, № 2. — С. 106–116.
 24. **Рихтмайер Р. Д., Мортон К. В.** Разностные методы решения краевых задач. — М.: Мир, 1972.
 25. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Гидродинамика. — М.: Наука, 1988.
 26. **Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.** Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: ГИФМЛ, 1963.
 27. **Зельдович Я. Б., Компанеев А. С.** Теория детонации. — М.: ГИТТЛ, 1955.
 28. **Кузьмицкий И. В.** О зависимости пространственно-временной структуры зоны химической реакции от начальной плотности взрывчатого вещества // Физика горения и взрыва. — 2004. — Т. 40, № 4. — С. 106–111.
 29. **Феоктистов Л. П.** Термоядерная детонация // Успехи физ. наук. — 1998. — Т. 168, № 11. — С. 1247–1255.
 30. **Федоров А. В.** Параметры пика Неймана и структура фронта детонационной волны конденсированных взрывчатых веществ // Хим. физика. — 2005. — Т. 24, № 10. — С. 13–21.

Поступила в редакцию 6/IV 2012 г.
