

ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НИЗКОСКОРОСТНОЙ ДЕТОНАЦИИ В ПЛАСТИФИЦИРОВАННОМ ОКТОГЕНЕ

К. Ф. Гребёнкин, М. В. Тараник, С. К. Царенкова, А. С. Шнитко

РФЯЦ, ВНИИ технической физики им. Е. И. Забабахина, 456770 Снежинск, k.f.grebyonkin@vniitf.ru

Рассматривается физическая модель низкоскоростной детонации в пластифицированном октогене, согласно которой низкоскоростная детонационная волна представляет собой комплекс из головной слабой ударной волны и следующей за ней волны сжатия. Этот комплекс формируется в результате совместного действия эффектов выделения энергии и разлета реагирующей среды. В двумерных расчетах воспроизведены основные особенности низкоскоростной детонации, наблюдаемые в экспериментах.

Ключевые слова: низкоскоростная детонация, горячие точки, двумерный гидрокод, порог инициирования, боковая разгрузка.

ВВЕДЕНИЕ

Обычно низкоскоростная детонация (НСД) проявляется в экспериментах как промежуточная стадия процесса перехода горения во взрыв. При определенных условиях НСД может протекать и в стационарном режиме (см. обзор [1]).

Известно, что в твердых взрывчатых веществах (ВВ) в зависимости от начальной пористости могут реализоваться разные механизмы НСД. В ВВ с высокой пористостью перенос энергии на фронте волны НСД происходит путем распространения нагретых газовых продуктов реакции через связанную сеть пор в исходном материале [1]. В пластифицированных ВВ, обладающих низкой пористостью, по видимому, реализуется иной физический механизм, такой же, как при нормальной детонации. А именно, происходят сжатие и нагрев ВВ на фронте головной ударной волны (УВ) и химические реакции идут за фронтом [1]. В пользу такого механизма НСД в низкопористых пластифицированных ВВ свидетельствует, например, тот экспериментальный факт [2], что постановка тонкой металлической пластины на пути распространения НСД не приводит к ее прерыванию.

Хотя общие представления о процессе НСД в плотных ВВ к настоящему времени уже сформировались, до сих пор нет ясности по многим важным для практики вопросам. В первую очередь, необходимо знать, при каких условиях может возникать НСД и в каком режиме она будет развиваться: произойдет ли затухание НСД, переход ее в нормальную или сформируется стационарный режим НСД.

Отдельной проблемой является расчет механического эффекта НСД. Получить полный ответ на эти вопросы чисто экспериментальным путем затруднительно, поскольку инициирующие воздействия и конфигурация исследуемой системы могут варьировать в широких пределах. Наиболее перспективный подход — это разработка физической модели НСД, ее верификация по доступной совокупности экспериментальных данных, а затем применение расчетной модели для прогнозирования последствий ситуаций, в которых может возникнуть НСД.

Целью данной работы является разработка такой модели для высокоплотных пластифицированных взрывчатых составов на основе октогена. Основной предпосылкой предлагаемой модели является хорошо известный эффект [3, 4] — наличие двух порогов ударно-волнового инициирования химических реакций в высокоплотных ВВ. Первый (нижний) представляет собой [3] порог зажигания ВВ ударной волной (или по терминологии работы [4] — возбуждения субдетонационных реакций), а второй (верхний) — это порог возбуждения нормальной детонации.

Можно предположить, что наличие двух порогов является результатом действия двух разных механизмов ударного зажигания «горячих точек», причем у механизма, ответственного за нижний порог, критическое давление меньше, но меньше и плотность горячих точек. Малая плотность горячих точек проявляется на макроуровне в том, что скорость химических реакций при субдетонационных давле-

ниях мала (см. следующий параграф). Обсуждение природы двух порогов зажигания горячих точек выходит за пределы данной работы, подчеркнем лишь, что возможность протекания заметного количества химических реакций при давлениях ударного сжатия, значительно меньших, чем требуется для возбуждения нормальной детонации, — это не предположение данной работы, а общеизвестный факт, подтвержденный в ряде независимых экспериментов (см. [5, с. 247]).

В пластифицированном октогене нижний порог регистрируется при воздействии слабых УВ с давлением на фронте порядка 0.1 ГПа [6, 7]. Верхний порог локализован в области давлений ≈ 3 ГПа, где наблюдается резкое повышение скорости химических реакций с ростом давления и происходит возбуждение нормальной детонации [8].

Следуя общепринятым представлениям [1], будем считать, что НСД в низкопористых ВВ представляет собой комплекс из головной УВ и следующей за ней зоны химической реакции. Основная идея модели, предлагаемой в данной работе, состоит в том, что из-за сильной боковой разгрузки давление на фронте головной УВ при низкоскоростной детонации значительно снижается по сравнению с нормальной и попадает в интервал между упомянутыми выше нижним и верхним порогами ударного инициирования химических реакций. В результате скорость реакций и, следовательно, энергия, выделяющаяся в зоне между фронтом головной УВ и звуковой поверхностью, оказывается, с одной стороны, намного меньше, чем при нормальной детонации, что приводит к пониженным значениям скорости детонации, а с другой стороны — достаточной для того, чтобы поддерживать стационарное распространение волны НСД.

В соответствии с изложенным выше физическим механизмом, возможность стационарного режима НСД является следствием совместного действия двух факторов — бокового разлета и наличия двух порогов ударного возбуждения химических реакций.

На качественном уровне предлагаемый физический механизм позволяет понять основные особенности НСД в высокоплотных пластифицированных ВВ, такие, например, как тот факт, что НСД возникает только при наличии боковой разгрузки или что скорость распространения НСД порядка скорости звука

и растет при увеличении толщины оболочки, окружающей цилиндрический заряд ВВ [2].

Для проверки предлагаемой модели было выполнено расчетное моделирование экспериментов [2], в которых наблюдалась НСД в цилиндрическом заряде из пластифицированного октогена с низкой пористостью ($< 2\%$), окруженном стальной оболочкой. Главный вопрос состоял в том, удастся ли получить стационарную НСД в прямых двумерных расчетах по предлагаемой модели.

ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МАКРОКИНЕТИКИ

Следуя интерпретации концепции горячих точек, предложенной в [9], макрокинетическую скорость изменения концентрации гетерогенного ВВ ξ представим в виде произведения трех сомножителей [10]:

$$-\frac{d\xi}{dt} \sim N^{1/3}(p_f)D(p, T)F(\xi), \quad (1)$$

где t — время, N — плотность «горячих точек» (очагов реакции), p_f — давление на фронте УВ, D — скорость распространения волны горения из горячих точек, T — температура, $F(\xi)$ — геометрический фактор.

Геометрический фактор можно оценить (см. [9]) из решения модельных задач типа задачи о разгорании из центра (hole burning), что дает $F(\xi) \sim (1 - \xi)^{2/3}$, или о сжигании сферической волны горения (grain burning), что дает $F(\xi) \sim \xi^{2/3}$. В моделях кинетики иногда используют обобщенное выражение вида [11]

$$F(\xi) \sim (1 - \xi)^{n_1} \xi^{n_2}, \quad (2)$$

которое приближенно учитывает эффект смены топологии горения и позволяет воспроизвести асимптотику геометрического фактора на начальной и конечной стадиях горения.

Элементарным образом можно рассчитать явный вид функции $F(\xi)$ в ячейочной модели горения, предполагающей, что горячие точки распределены в узлах регулярной пространственной сетки [5]. Однако в этом приближении не учитывается тот факт, что очаги реакции случайным образом распределены по объему ВВ.

Чтобы получить геометрический фактор $F(\xi)$ с учетом случайного распределения горячих точек, рассмотрим модельную задачу [10], в которой два других множителя (N и D),

входящие в уравнение (1), считаются постоянными. Тогда, рассчитав зависимость выгорания от времени, можно оценить геометрический фактор по формуле

$$F(\xi) = -\frac{d\xi}{dt} \frac{1}{N^{1/3}D}. \quad (3)$$

В данной работе численное моделирование зависимости выгорания от времени $\xi(t)$ (при случайном распределении горячих точек) проводилось на трехмерной сетке из кубических ячеек. Полагалось, что в ячейках, в которых находится непрореагировавшее ВВ, значение концентрации ВВ равно единице, а в ячейках, содержащих продукты взрыва (ПВ), концентрация ВВ равна нулю. Случайным образом задавались начальные координаты нескольких горячих точек — одиночных ячеек. Предполагалось, что из очагов реакции происходит распространение волн горения с постоянной скоростью. На каждом временном шаге (по мере роста горячих точек) проверялось условие принадлежности каждой ячейки тому или иному очагу; если оказывалось, что данная ячейка расположена на расстоянии $\leq Dt$ от какого-либо очага, то значение концентрации ВВ в этой ячейке принималось равным нулю.

Было проведено 100 вариантов таких модельных расчетов концентрации ВВ $\xi(t)$ с разными начальными положениями очагов реакции, выбранными случайным образом. Затем была получена осредненная по начальным конфигурациям зависимость $\langle \xi(t) \rangle$. Эта зависимость была сглажена сплайнами, после чего

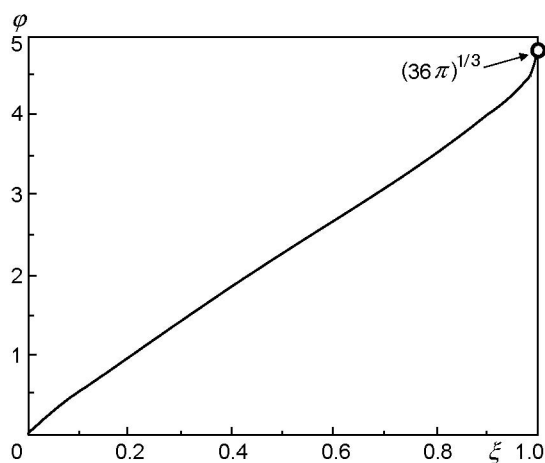


Рис. 1. Зависимость модифицированного геометрического фактора от концентрации ВВ

го проводилось ее численное дифференцирование, и по формуле (3) получали функцию $F(\xi)$. Удобно ввести новую функцию $\varphi(\xi) = \frac{F(\xi)}{(1-\xi)^{2/3}}$. На рис. 1 показана полученная в модельных расчетах зависимость этой функции от концентрации ВВ.

При малых выгораниях (когда нет перекрывания очагов) результаты численных расчетов должны совпадать с оценками по ячейочной модели, согласно которой

$$1 - \xi \approx \frac{4}{3}\pi r^3 N, \quad (4)$$

где r — средний радиус очага реакции в данный момент. При проведении этих оценок предполагалось равенство плотностей ВВ и ПВ в гетерогенной реагирующей среде, в этом случае выгорание $1 - \xi$ равно отношению объема выгоревшей области к среднему объему, приходящемуся на один очаг реакции, который, очевидно, равен $1/N$.

Из (4) следует связь концентрации ВВ с радиусом очага на начальной стадии горения:

$$r = \left[\frac{3(1-\xi)}{4\pi N} \right]^{1/3}. \quad (5)$$

С учетом (4) и (5) макрокинетическую скорость реакций можно представить в виде

$$-\frac{d\xi}{dt} = 4\pi r^2(t)DN = 4\pi DN \left[\frac{3(1-\xi)}{4\pi N} \right]^{2/3}, \quad (6)$$

где $D = \frac{dr}{dt}$ — скорость распространения волны горения из очага.

Из (3) и (6) следует выражение для модифицированного геометрического фактора на начальной стадии реакций, когда очаги реакции еще не перекрываются:

$$\begin{aligned} \varphi(\xi) &= -\frac{d\xi}{dt} \frac{1}{(1-\xi)^{2/3}N^{1/3}D} = \\ &= 4\pi \left[\frac{3}{4\pi} \right]^{2/3} = (36\pi)^{1/3}. \end{aligned}$$

Это предельное значение воспроизводилось в численных расчетах (см. рис. 1).

Из рис. 1 видно, что модифицированный геометрический фактор $\varphi(\xi)$ можно аппроксимировать линейной функцией концентрации

$\varphi(\xi) \approx 4.5\xi$. Поэтому в данной работе для геометрического фактора принято выражение $F(\xi) \approx 4.5\xi(1 - \xi)^{2/3}$, что соответствует выражению (2) при значениях параметров $n_1 = 2/3$ и $n_2 = 1$.

Скорость распространения волны горения из очагов реакций в ударно-сжатом ВВ можно оценить как [12]

$$D \approx \sqrt{\chi_1 / \tau_1},$$

где τ_1 — время реакции, χ_1 — коэффициент температуропроводности кристаллического ВВ в зоне прогрева. Оба параметра взяты при температуре, близкой к температуре ПВ [12]. Если предположить [13], что передача энергии из горячих точек происходит за счет электронной теплопроводности, то

$$\chi \sim \exp\left(-\frac{\varepsilon_a}{2RT}\right),$$

где ε_a — энергия активации электронов проводимости в кристаллическом ВВ, R — универсальная газовая постоянная. Если следовать более традиционной точке зрения, согласно которой передача энергии из горячих точек происходит путем фононной теплопроводности, то в последующих оценках следует положить $\varepsilon_a = 0$.

Будем считать, что время реакций в волне горения, распространяющейся из горячей точки, описывается законом Аррениуса

$$\tau \sim \exp\frac{E_a}{RT},$$

тогда зависимость скорости волны горения от температуры будет иметь вид

$$D \sim \exp\left(-\frac{T_{eff}}{T}\right),$$

где эффективное значение температуры активации равно

$$T_{eff} = \frac{\varepsilon_a}{4R} + \frac{E_a}{2R}.$$

Воспользуемся преобразованием Франк-Каменецкого [14] — разложим аргумент экспоненты, т. е. функцию $\Phi(T) = -\frac{T_{eff}}{T}$, в ряд Тейлора в окрестности некоторой характерной температуры T_0 :

$$\Phi(T) \approx \Phi(T_0) + \alpha(T - T_0), \quad (7)$$

$$\text{где } \alpha = \frac{d \ln D}{dT} = \frac{T_{eff}}{T_0^2}.$$

Характерное значение температуры ПВ октогена можно оценить как $T_0 \approx q/c_{EP}$, где q — калорийность, c_{EP} — теплоемкость ПВ. Согласно [15] $q \approx 1.3$ ккал/г и $c_{EP} \approx 0.35$ кал/(г · К), следовательно, характерное значение температуры ПВ октогена можно оценить как $T_0 \approx 4000$ К. Эта оценка хорошо согласуется с литературными данными [16].

Оценим теперь значение параметра T_{eff} . В работе [17] показано, что зависимость скорости реакций октогена от температуры в широком диапазоне давлений и температур можно описать законом Аррениуса с энергией активации $E_a = 36$ ккал/моль или 18000 К. Что касается параметра ε_a , то его значение для октогена можно оценить как $1.5 \div 2.0$ эВ или ≈ 20000 К. Эта оценка получается из известного значения ширины запрещенной зоны октогена, которая при нормальных условиях составляет ≈ 3 эВ (см. [18]), и того факта, что энергия активации электронов проводимости в молекулярных кристаллах органических веществ обычно в $1.5 \div 2$ раза меньше ширины запрещенной зоны (см. анализ экспериментальных данных в [19]).

Таким образом, значение T_{eff} для октогена можно оценить как

$$T_{eff} \approx 18000/2 + 20000/4 = 14000 \text{ К}$$

и значение параметра α как

$$\alpha = \frac{T_{eff}}{T_0^2} \approx \frac{14000}{4000^2} \approx 9 \cdot 10^{-4} \text{ К}^{-1}.$$

Столь малое значение параметра α указывает на то, что скорость волны горения практически не меняется при изменении интенсивности инициирующей УВ в области, где наблюдается порог инициирования детонации октогена (ориентировочно в диапазоне давлений $2 \div 4$ ГПа).

Действительно, изменение температуры ПВ при изменении давления на фронте инициирующей УВ характеризуется производной $\frac{dT_{EP}}{dp} \approx \frac{1}{c_{EP}} \frac{dE_{HE}(p)}{dp}$, где $E_{HE}(p)$ — плотность энергии непрореагировавшего ВВ за фронтом УВ. По оценкам, на ударной адиабате ВВ при интересующем нас давлении ≈ 4 ГПа $\frac{dE_{HE}(p)}{dp} \approx 50$ Дж/(г · К) и, следовательно,

$$\frac{dT_{EP}}{dp} \approx \frac{50 \text{ Дж}/(\text{г} \cdot \text{ГПа})}{1.5 \text{ Дж}/(\text{г} \cdot \text{К})} \approx 30 \text{ К/ГПа}.$$

Изменение функции $\Phi(T)$ (7) при изменении давления на фронте инициирующей УВ на Δp можно оценить как

$$\Delta\Phi \approx \alpha \frac{dT_{EP}}{dp} \Delta p,$$

что для $\Delta p = 2$ ГПа (изменение давления от 2 до 4 ГПа, когда в экспериментах наблюдается переход через порог инициирования детонации) составит $\Delta\Phi \approx 9 \cdot 10^{-4} \cdot 30 \cdot 2 = 0.05$. Макрокинетическая скорость реакции пропорциональна $\exp[\Phi(T)]$, поэтому изменению Φ на 5 % будет соответствовать изменение скорости реакций на 5 %. Если предположить, что передача энергии в волне горения происходит путем фононной (а не электронной) теплопроводности, то $\Delta\Phi$ и соответствующее изменение скорости реакций будут еще меньше, поскольку в этом случае нужно положить $\varepsilon_a = 0$, что повлечет за собой уменьшение значений параметров T_{eff} и α .

Экспериментальные данные по инициированию детонации указывают на то, что при повышении давления на фронте УВ от 2 до 4 ГПа скорость реакций в ударно-сжатом ВВ резко возрастает и происходит инициирование нормальной детонации. Однако из приведенных выше оценок следует, что ускорение макрокинетической скорости реакций за счет увеличения скорости волн горения очень мало при таком изменении давления. Следовательно, в области давлений, характерных для инициирования нормальной детонации в пластифицированном октогене, множитель $D(T, p)$ в уравнении (1) изменяется слабо и его можно считать постоянной величиной.

Это означает, что основным физическим механизмом порога возбуждения нормальной детонации в октогене скорее всего является резкое увеличение плотности горячих точек при повышении интенсивности инициирующей УВ. Дополнительное подтверждение этого вывода дают результаты расчетов формирования горячих точек при схлопывании пор в пластифицированном октогене (см., например, [20]), сжатом УВ. Согласно этим расчетам резкий рост плотности горячих точек происходит как раз при повышении инициирующего давления от 2 до 4 ГПа.

Далее будем рассматривать макрокинетическую скорость реакции в виде произведения

геометрического фактора, полученного выше, и плотности горячих точек, являющейся функцией давления на фронте первой УВ. Таким образом, модель основана на предположении о том, что скорость реакций в основном определяется давлением на фронте УВ и слабо зависит от параметров текущего состояния ВВ. Реалистичность этого предположения подтверждается не только приведенными выше оценками, но и результатами экспериментов [3], где наблюдалось повышение скорости разлета свободной поверхности ТНТ, разгружающегося после воздействия УВ подпороговой интенсивности. Это означает, что в процессе разгрузки интенсивные реакции в ВВ продолжают и снижение давления не приводит к резкому уменьшению скорости реакций.

ПОСТАНОВКА РАСЧЕТОВ

Исходя из физической модели, изложенной выше, уравнение макрокинетики (1), описывающее превращение ВВ в ПВ, представим в виде

$$-\frac{d\xi}{dt} = ZG(p_f)F(\xi), \quad (8)$$

где Z — размерный параметр модели, $G(p_f) = \left(\frac{N(p_f)}{N_0}\right)^{1/3}$ — функция, описывающая зависимость плотности горячих точек от давления p_f на фронте первой УВ, N_0 — характерная плотность горячих точек.

На данном этапе рассчитать функцию $G(p_f)$ не представляется возможным, поэтому была использована эмпирическая формула

$$G(p_f) = \begin{cases} 0 & \text{при } p_f < p_1, \\ A + Bp_f^C & \text{при } p_f \geq p_1. \end{cases} \quad (9)$$

Формула (9) представляет собой простейшую реализацию идеи о существовании двух порогов ударно-волнового инициирования химических реакций в ВВ. p_1 — это значение нижнего порога. Как обсуждалось выше, его можно принять равным 0.1 ГПа. Параметр A определяет эффективное значение скорости реакций в субдетонационной области при давлениях $0.1 \div 1$ ГПа. Параметры B и C определяют скорость реакций в области высоких давлений, где происходит инициирование нормальной детонации. В данной работе использовалась система единиц, в которой в качестве

единицы времени принимаются 10 мкс, давления — 1 ГПа, плотности — 1 г/см³, длины — 1 см и т. д. Значения параметров кинетики выбраны равными $A = 0.015$, $B = 0.006$ и $C = 3$ и $Z = 1$. С этими значениями с точностью $\approx 30\%$ в расчетах воспроизводятся экспериментальные значения глубины возникновения детонации в РВХ-9501 (95 % октогена) при инициировании ступенчатым импульсом в диапазоне давлений 2.5 ÷ 6 ГПа [21]. Верхний порог ударного инициирования реакций воспроизводится в расчетах благодаря резкому росту макрокинетической скорости реакций в этом диапазоне давлений, что обеспечивается за счет степенного члена, фигурирующего в формуле (9).

Заметим, что зависимость скорости реакций от давления в виде, сходном с (9), недавно была предложена в работе [22] для описания НСД. Однако в [22] предполагалась зависимость от текущего значения давления среды $p(t)$, в то время как в рассматриваемой модели фигурирует более обоснованная с точки зрения физики зависимость от давления на фронте головной УВ p_f , прошедшей через данную частицу среды. Это отличие имеет принципиальный характер; как будет видно далее, сам факт существования НСД подтверждает определяющую роль p_f в кинетике разложения октогена в условиях низкоинтенсивных воздействий.

При проведении расчетов уравнение состояния непрореагировавшего ВВ было взято в виде

$$p = \frac{\rho_0 c_0^2}{n} (\delta^n - 1), \quad (10)$$

где $\delta = \rho/\rho_0$ — сжатие, ρ и ρ_0 — плотность ВВ и ее начальное значение, c_0 и n — константы. Тепловая составляющая давления не учитывалась, так как нас интересует область сравнительно низких давлений, где вкладом теплового члена можно пренебречь [23]. Влияние пористости на уравнение состояния не учитывали, так как она мала (согласно [2] менее 2 %), и принимали $\rho_0 = 1.823$ [2], $c_0 = 2.4$ [6]. Параметр $n = 7$ был выбран так, чтобы описать ударную адиабату пластифицированного октогена [8] $D = 2.423 + 1.883u$, где D — скорость распространения УВ, u — массовая скорость вещества.

Уравнение состояния ПВ было взято в виде $p = K\rho^m$ [23], параметры $K = 2.44$ и $m = 3$ выбраны так, чтобы описать приведенные в [2] значения скорости нормальной детонации $D =$

8.77 км/с и давления Жуге $p_{Ж} = 35$ ГПа.

По логике модели горячих точек уравнение состояния гетерогенной смеси ВВ и ПВ в зоне реакции можно рассчитать в предположении механического равновесия ВВ и ПВ, что для рассматриваемых в данной работе уравнений состояния сводится к решению системы уравнений

$$p = \frac{\rho_0 c_0^2}{n} \left[\left(\frac{\rho_{HE}}{\rho} \right)^n - 1 \right] = K\rho_{EP}^m,$$

$$\frac{1}{\rho} = \frac{\xi}{\rho_{HE}} + \frac{1-\xi}{\rho_{EP}},$$

где ρ , ρ_{HE} и ρ_{EP} — значения средней плотности гетерогенной реагирующей среды и ее компонентов — ВВ и ПВ. На рис. 2 приведены результаты численного решения этой системы в сравнении с расчетом по приближенной интерполяционной формуле [24]

$$p(\rho, \varepsilon) = \xi p_{HE}(\rho, \varepsilon) + (1 - \xi) p_{EP}(\rho, \varepsilon) \quad (11)$$

для разных значений концентрации ВВ. Видно, что описание уравнения состояния смеси с помощью интерполяционной формулы (11) является вполне разумным приближением.

Начальная геометрия расчетов, моделирующая постановку экспериментов [2], показана на рис. 3. Нижняя горизонтальная линия обозначает ось симметрии системы. Область 1 моделирует инициирующий участок, на котором

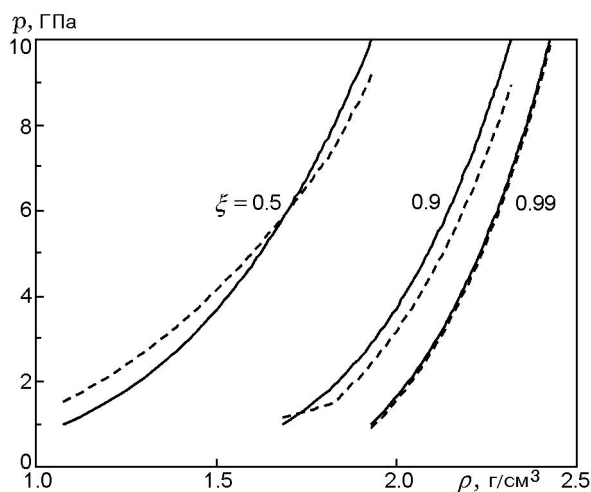


Рис. 2. Зависимость давления гетерогенной смеси ВВ—ПВ от ее средней плотности и концентрации ВВ:

сплошные линии — результат выравнивания давлений, штриховые — расчет по интерполяционной формуле (11)

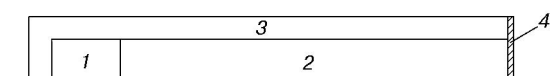


Рис. 3. Начальная геометрия расчетов, моделирующих эксперименты [2]:

области 1 и 2 — диаметр 16 мм, длина 40 (1) и 400 мм (2); толщина оболочки 3 — 22 мм; толщина алюминиевой пластины 4 — 1 мм

производилось зажигание ВВ в экспериментах. Его длина равна 40 мм, начальная плотность принималась равной 2.0 г/см^3 , использовалось уравнение состояния идеального газа с показателем адиабаты $\gamma = 1.5$. В начальный момент в инициирующей области задавалась внутренняя энергия 1.5 кДж/г , чему соответствует начальное давление в области 1.5 ГПа . Как показали расчеты, если инициирующее давление лежит в интервале между нижним и верхним пороговыми значениями, то влияние параметров инициирующей области сказывается лишь на начальном участке длиной порядка 100 мм, а затем начальные условия «забываются» и формируется стационарная НСД.

Область 2 — это заряд ВВ длиной 400 мм и диаметром 16 мм [2], принятые здесь уравнения состояния и модель кинетики описаны выше. Область 3 — стальная труба толщиной 22 мм, здесь применялось уравнение состояния в виде

$$p(\rho, \varepsilon) = p_x(\rho) + \Gamma \rho [\varepsilon - \varepsilon_x(\rho)],$$

где $p_x(\rho)$ имеет вид (10),

$$\varepsilon_x(\rho) = \int \frac{p_x(\rho')}{\rho'^2} d\rho'.$$

Значения параметров уравнения состояния $\rho_0 = 7.8 \text{ г/см}^3$, $c_0 = 3.0 \text{ км/с}$, $n = 3.0$, $\Gamma = 2.0$. При проведении расчетов учитывались упругопластические свойства стальной оболочки, эффективное значение динамического предела текучести оболочки принято равным 0.5 ГПа .

Использовалась расчетная сетка в ВВ с размерами $1 \times 1 \text{ мм}$, что оправданно при моделировании НСД, когда давление за фронтом головной УВ изменяется сравнительно медленно. Расчеты проводились по двумерной газодинамической программе ГРАД [25] в режиме лагранжева счета с использованием искусственной вязкости.

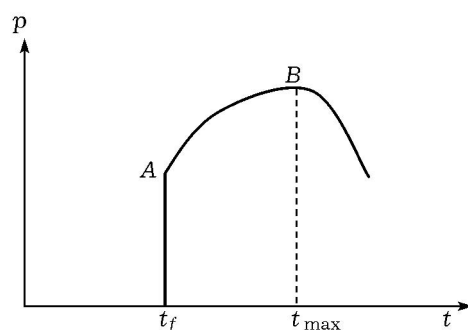


Рис. 4. Схематичная зависимость давления от времени при воздействии слабой ударной волны на ВВ

Нетривиальной задачей является выделение фронта УВ в расчетах с искусственной вязкостью. Стандартный алгоритм выделения фронта УВ по максимуму давления некорректен в условиях низкоинтенсивных воздействий, когда химические реакции в ВВ протекают сравнительно медленно, и давление в лагранжевой ячейке может возрастать после прохождения УВ (рис. 4). Именно такая ситуация реализуется в экспериментах с низким инициирующим давлением — см., например, [6, 7]. Как видно из рис. 4, фронт волны приходит в данную частицу вещества в момент t_f , а максимальное давление в этой частице реализуется совсем в другой момент — t_{\max} . Проблема состоит в том, что в расчетах с искусственной вязкостью фронт УВ «размазывается» на несколько счетных ячеек, что затрудняет определение момента t_f по результатам расчетов.

В данной работе за основу принят другой известный алгоритм определения положения фронта УВ. Идея алгоритма состоит в том, чтобы отслеживать положение точки, в которой реализуется максимум искусственной вязкости, т. е. максимум градиента скорости. Обычно в расчетах УВ «размазывается» на три счетные ячейки. Таким образом, фронт УВ расположен на некотором (небольшом) расстоянии от точки, где искусственная вязкость максимальна. Очевидно, что это расстояние порядка размера расчетной ячейки. Исходя из этих соображений был предложен следующий алгоритм расчета давления на фронте УВ и соответствующего ему времени прихода УВ в данную ячейку:

— определяется момент времени t_0 , когда в данной ячейке максимальна искусственная вязкость;

— в качестве момента прихода УВ в данную ячейку принимается $t_f = \min(t_{\max}, t_0 + \Delta t)$, где t_{\max} — момент, когда давление в данной ячейке максимально и $\Delta t \sim \delta/D$. Здесь $\delta = 1$ мм — начальный размер расчетной ячейки, D — скорость УВ.

Смысл алгоритма очень прост. Предполагается, что фронт УВ приходит в данную ячейку с определенной задержкой по времени Δt после момента достижения максимума искусственной вязкости t_1 . Если в течение этой задержки достигается максимум давления в данной ячейке, т. е. возрастания давления за фронтом нет, то t_f определяется по условию максимума давления. Для сетки с размером ячеек в ВВ, равным 1 мм, выбрано значение задержки $\Delta t = 0.5$ мкс.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Полученная в расчетах зависимость положения осевого участка фронта головной УВ от времени показана на рис. 5. Видно, что на конечном участке трубы длиной 400 мм скорость головной УВ выходит на стационарное значение ≈ 2.4 км/с, что согласуется с экспериментальными значениями скорости распространения НСД, лежащими в пределах $2.3 \div 2.7$ км/с [2] в зависимости от сорта стали, из которой была изготовлена оболочка.

В экспериментах [2] измерялась также зависимость скорости полета торцевой алюминиевой пластины толщиной 1 мм от времени, сравнение с соответствующим результатом расчета дано на рис. 6. Расчеты неплохо описывают экспериментальные данные, в частности воспроизводят плавный характер разгона пластины.

На рис. 7 приведено сравнение расчетной и экспериментальной зависимостей давления от времени в точке, отстоящей на 350 мм от инициирующего участка. Начальный участок расчетной зависимости согласуется с экспериментальными данными [2]. Однако начиная с момента времени $3 \div 4$ мкс расчетное давление быстро снижается, а экспериментальное ведет себя совершенно иначе — сначала незначительно снижается, а потом опять возрастает. В качестве вероятной причины столь сильного расхождения давлений на больших временах можно предположить некорректную работу датчика в результате его прогрева под действием высоких температур, возникающих за фронтом

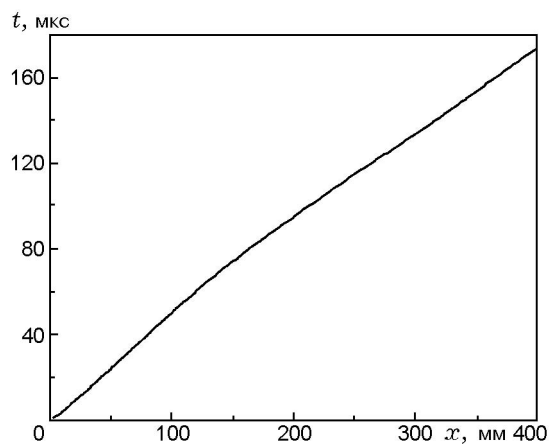


Рис. 5. Расчетная x - t -диаграмма распространения головной УВ по оси цилиндрического заряда ВВ в условиях эксперимента [2]

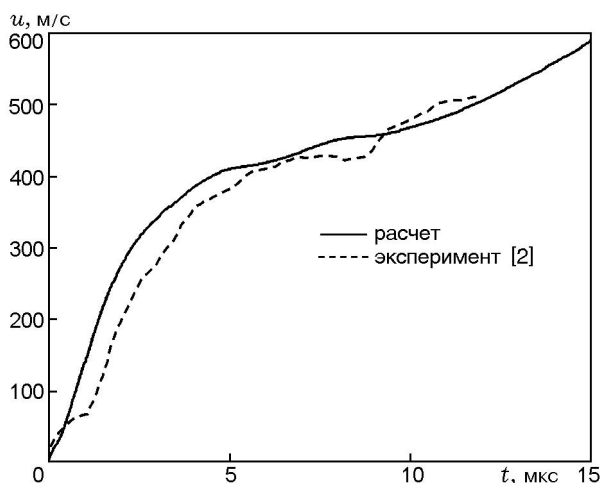


Рис. 6. Зависимость скорости полета торцевой алюминиевой пластины толщиной 1 мм от времени

головной УВ. Аргументом в пользу такого объяснения является хорошее расчетное описание экспериментальных данных по скорости полета торцевой пластины, что было бы невозможно, если бы расчетный профиль давления значительно отличался от того, что имеет место в реальности. Для выяснения причин расхождения необходимо исследовать вопрос о продолжительности нормального функционирования датчиков давления за фронтом волны НСД.

С учетом этой оговорки можно сделать вывод, что в расчетах воспроизводятся основные особенности экспериментальных данных по НСД в пластифицированном октогене [2].

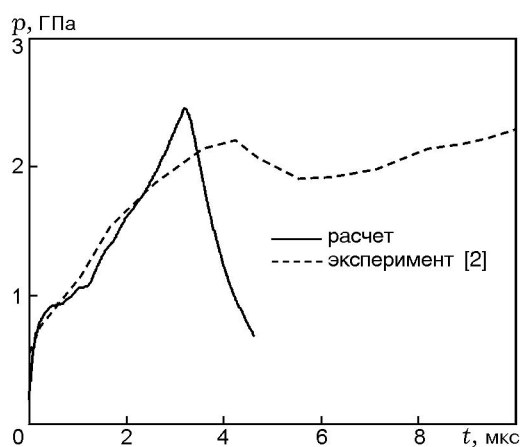


Рис. 7. Давление на расстоянии 350 мм от инициирующего участка

В прямых двумерных расчетах получено стационарное распространение НСД со скоростью, близкой к скорости звука, что указывает на гидродинамический механизм распространения детонационного комплекса. Начальный участок кривой давления (см. рис. 7) длительностью 0.1 мкс, на котором происходит быстрое возрастание давления, можно интерпретировать как «размазанный» фронт УВ. В расчетах «размазывание» фронта происходит за счет искусственной вязкости, а в экспериментах — из-за конечного временного разрешения регистрирующей аппаратуры. Как видно из рис. 7, амплитуда давления на фронте головной УВ составляет $0.5 \div 1.0$ ГПа и действительно лежит между нижним и верхним порогом инициирования, обсуждавшимися в начале данной работы. За фронтом головной УВ давление плавно нарастает, что можно объяснить совместным действием двух факторов — выделением энергии и боковым разлетом. Если доминирует первый фактор, то возникает нормальная детонация, а если второй — детонация затухает. Как показывают двумерные расчеты, возможен и промежуточный случай: при определенном балансе этих двух факторов возникает стационарная НСД и за УВ следует волна сжатия. В расчетах удалось получить стационарное распространение такой структуры благодаря той особенности модели, что макрокинетическая скорость реакций определяется давлением на фронте головной УВ и не повышается с ростом давления в волне сжатия. Если бы было принято обычное предположение, что скорость реакций зависит от текущего

значения давления $p(t)$, то в расчетах реализовалось бы сильное ускорение реакций в волне сжатия. За счет этого повысилась бы интенсивность головной УВ, и в результате произошел бы переход к нормальной детонации.

Из рассматриваемой физической модели НСД вытекает ряд следствий, которые можно проверить в эксперименте. Во-первых, если увеличить диаметр ВВ по сравнению с тем, что было реализовано в условиях опытов [2], то начиная с определенного значения диаметра стационарная НСД будет невозможна. Реализуется переходный процесс, и если длина заряда достаточно велика, то в какой-то момент обязательно возникнет нормальная детонация.

Во-вторых, стационарная НСД может реализоваться и в том случае, когда нет инертной оболочки, сдерживающей разлет заряда. Естественно, для возникновения НСД в «голом» заряде его диаметр должен быть намного больше, чем в опытах с оболочкой. Этот вопрос исследовался в серии расчетов, в которой цилиндрический заряд ВВ без оболочки инициировался с торца прямоугольным импульсом давления с амплитудой 1 ГПа и длительностью 10 мкс. Было получено, что в заряде диаметром 100 мм возникает НСД, в заряде диаметром 50 мм инициирующая УВ затухает и, наконец, в заряде диаметром 200 мм инициируется нормальная детонация.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе предложена физическая модель низкоскоростной детонации в пластифицированном октогене. В прямых двумерных расчетах получен стационарный режим ее распространения и удалось воспроизвести большинство экспериментальных результатов, описанных в работе [2]. Исключения составляют измерения зависимости давления от времени, где результаты расчетов и экспериментов сначала в течение $3 \div 4$ мкс после прихода головной ударной волны согласуются, а затем кардинально расходятся — падение давления в расчетах и рост в эксперименте. Возможно, это расхождение объясняется некорректной работой манганиновых датчиков из-за их перегрева в реагирующем взрывчатом веществе. Этот вопрос требует дополнительного исследования.

В целом результаты расчетов подтвердили предположение о том, что волна низкоскоростной детонации в пластифицированном ок-

тогене представляет собой комплекс из головной ударной волны с давлением на фронте ≈ 1 ГПа и следующей за ней волны сжатия. Стационарное распространение такой структуры возможно лишь при определенном сочетании скорости энерговыделения и интенсивности боковой разгрузки.

Для проверки и уточнения предлагаемой модели большой интерес представляют измерения нижнего и верхнего предельных значений диаметра заряда, определяющих область, где возможна стационарная низкоскоростная детонация. Для «голового» цилиндрического заряда взрывчатого вещества они оцениваются как 50 и 200 мм соответственно. Для заряда с оболочкой, сдерживающей разлет, оба граничных значения интервала диаметров, в котором возможна стационарная низкоскоростная детонация, должны быть меньше, чем без оболочки. Эти значения, очевидно, будут зависеть от толщины и материала оболочки. Разумеется, для возбуждения низкоскоростной детонации требуется не только подходящая конфигурация заряда, но и специфический иницирующий импульс, интенсивность которого должна быть меньше, чем порог возбуждения нормальной детонации, но больше, чем порог иницирования субдетонационных реакций.

Многочисленные двумерные расчеты, выполненные при проведении данной работы, наглядно показали, что стационарная низкоскоростная детонация возникает лишь при одновременном выполнении двух условий — обеспечении низкоинтенсивного иницирования и наличии подходящей конфигурации заряда. Намного вероятнее ее проявление как промежуточной стадии переходного процесса к нормальной детонации. Эту стадию необходимо адекватно учитывать при прогнозировании последствий низкоинтенсивных воздействий на заряды большого размера и системы с инертной оболочкой.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ermolaev B. S., Sulimov A. A. Advances and problems in DDT in solids // Fifth Intern. Symp. High Dynamic Pressures. Saint-Malo, France, 2003. V. 1. P. 15–26.
2. Leuret F., Chaisse F., Presles H. N., Veyssiere B. Experimental study of the low velocity detonation regime during the deflagration to detonation transition in a high density explosive // Proc. 11th Symp. (Intern.) on Detonation. Snowmass, Colorado, 1998. P. 693–700.
3. Taylor B. C., Ervin L. H. Separation of ignition and buildup to detonation in pressed TNT // Proc. 6th Symp. (Intern.) on Detonation. Coronado, California, 1976. P. 3–10.
4. Tasker D. G. Shock initiation and subsequent growth of reaction in explosives and propellants: the low amplitude shock initiation test // Proc. 7th Symp. (Intern.) on Detonation. Annapolis, Maryland, 1981. P. 285–298.
5. Физика взрыва / Под ред. Л. П. Орленко. 3-е изд. М.: Физматлит, 2002. Т. 1.
6. Уртъев П. А., Тарвер К. М., Грин Л.-Р. Низкоскоростной удар и иницирование LX-10 // Хим. физика. 1998. Т. 14, № 12. С. 78–92.
7. Грин Л., Нидик Е., Ли Е., Тарвер К. Иницирование химического разложения РВХ-9404 слабыми ударными волнами // Детонация и взрывчатые вещества. М.: Мир, 1981. С. 107–122.
8. Уокерли Дж., Раби Р., Гинсберг М., Андерсон А. Исследование ударноволнового иницирования РВХ-9404 // Там же. С. 269–290.
9. Лобанов В. Ф. Моделирование детонационных волн в гетерогенном конденсированном ВВ // Физика горения и взрыва. 1980. Т. 16, № 6. С. 113–116.
10. Гребенкин К. Ф., Жеребцов А. Л., Тараник М. В., Царенкова С. К., Шнитко А. С. Физическая модель ударно-волнового иницирования детонации пластифицированного ТАТБ // Физика горения и взрыва. 2006. Т. 42, № 5. С. 117–126.
11. Starkenberg J. Modeling detonation propagation and failure using explosive initiation models in a conventional hydrocodes // Proc. 12th Symp. (Intern.) on Detonation. San Diego, California, 2002. P. 1001–1007.
12. Кришеник П. М., Шкадинский К. Г. Высокотемпературный тепловой фронт с нелинейной теплопроводностью // Докл. АН. 2003. Т. 392, № 6. С. 761–766.
13. Гребенкин К. Ф. Полупроводниковая модель детонации: состояние дел // Хим. физика. 2005. Т. 24, № 11. С. 18–25.
14. Математическая теория горения и взрыва / Я. Б. Зельдович, Г. И. Баренблат, В. Б. Либрович, Г. М. Махвиладзе. М.: Наука, 1980.
15. Tarver C. M., Chidester S. K., Nichols A. L. Critical conditions for impact and shock induced hot spots in solid explosives // J. Phys. Chem. 1996. V. 100. P. 5794–5799.
16. Мейдер Ч. Численное моделирование детонации. М.: Мир, 1985.
17. Henson B. F., Smilowitz L., Asay B. W., et al. Evidence for thermal equilibrium in the detonation of HMX // Proc. 12th Symp. (Intern.) on Detonation. San Diego, California, 2002. P. 987–992.

18. **Kuklja M. M., Aduiev B. P., Aluker E. D., et al.** Role of electron excitations in explosive decomposition of solids // *J. Appl. Phys.* 2001. V. 89, N 7. P. 4156–4166.
19. **Гребенкин К. Ф., Жеребцов А. Л., Тараник М. В.** Электронная теплопроводность при распространении волны горения из «горячих точек» в детонирующем ТАТБ // *Физика горения и взрыва*. 2005. Т. 41, № 5. С. 100–104.
20. **Menikoff R.** Pore collapse and hot spots in HMX // *Shock Compression of Condensed Matter-2003* / M. D. Furnish, Y. M Gupta, J. W. Forbes (Eds). AIP, 2004. P. 393–396.
21. **LASL Explosive Property Data.** Univ. of California Press, 1980.
22. **Ermolaev B. S., Khasainov B. A., Presles H.-N., Vidal P.** A simple approach for modeling reaction rate in shocked multi-component solid explosives // *Proc. of the European Combustion Meeting*. 2005. www.gtcombustion.asso.fr/ecm/2005/212_Khasainov.pdf.
23. **Забабахин Е. И.** Некоторые вопросы газодинамики взрыва. Снежинск, 1978.
24. **Копышев В. П., Прошин М. М.** Численное моделирование химического пика // *Мат. моделирование*. 1991. Т. 3, № 9. С. 41–48.
25. **Suchkov V. A., Shnitko A. S.** Technique and set of programs GRAD for solution of nonstationary problems of continua mechanics // *Third Joint Conf. on Computational Mathematics*. Los Alamos, NM, USA, January 23–27, 1995.

Поступила в редакцию 5/XII 2006 г.