ЛИТЕРАТУРА

1. Б. Я. Светлов. Сб. «Взрывное дело», № 52/9. М., Госгортехиздат, 1963.
2. M. A. Cook, A. S. Fillerttal. J. Phys. Chem. 61, 1957, 2, 189.
3. Ю. Б. Харитон, С. Б. Ратнер. ЖФХ, 1946, 20, 2.
4. А. Н. Дремин, П. Ф. Похил, М. И. Арифов. Докл. АН СССР, 1960, **131**, 5.
5. А. Я. Апин, Е. П. Бардин, Н. Ф. Велина. Сб. «Взрывное дело», № 52/9. М., Госгортехиздат, 1963.
6. А. Ф. Беляев, Р. Х. Курбангалина. Сб. «Физика взрыва», № 4, 1955.
7. Я. Б. Зельдович, А. С. Компанеец. Теория детонации. М., 1955.
8. Справочник «Термодинамические свойства индивидуальных веществ». М., Изд-во АН СССР, 1962.

УДК 532.593 + 662.217.7

РАСЧЕТ ПРОЦЕССА ВОЗБУЖДЕНИЯ ДЕТОНАЦИИ УДАРНОЙ ВОЛНОЙ СО СПАДАЮЩИМ ПРОФИЛЕМ ДАВЛЕНИЯ В ЖИДКИХ ВВ

С. Н. Буравова, А. Н. Дремин
(Москва)

Механизм возбуждения реакции ударной волны принято считать тепловым, хотя прямое доказательство такого фактора отсутствует. Оценки температуры ударно сжатого вещества [1—5] показывают, что температура за фронтом ударной волны достаточно велика, и тепловой механизм возбуждения реакции может объяснить особенности развития реакции за ударной волной.

Время развития реакции и гомогенных ВВ мало — несколько микросекунд и менее, что позволяет пренебречь процессами переноса и рассматривать взрыв в адиабатических условиях без отвода тепла.

Предполагается, что константы скорости мономолекулярного распада не зависят от степени сжатия вещества, иными словами, молекула в процессе сжатия не деформируется, а характеристические частоты колебаний атомов в молекуле не меняются.

Химические реакции в ударной волне принято описывать реакцией нулевого порядка [1—5]. Эта модель упрощает действительные кинетические закономерности и наиболее проста и удобна при количественной обработке экспериментального материала, поскольку не учитывает зависимость скорости реакции от концентрации продуктов.

Когда ударная волна не имеет прямоугольного профиля (за ударной волной следует волна разряжения), в сжатом веществе происходит два конкурирующих процесса: химическая реакция увеличивает температуру вещества, волна разряжения — снижает. От преобладания одного из процессов зависит, будет ли иметь место быстрое самоускорение реакции, необходимое для развития взрыва. Если волна разгрузки компенсирует увеличение температуры, реакция теряет взрывной характер.

Данная работа предпринята с целью провести учет действия волны разряжения.

Задача сводится к совместному решению уравнений гидродинамики и кинетики. В общем случае такая система может быть решена численно на электронно-вычислительной машине. Однако для определения возможности взрыва и оценки периода индукции за ударной волной задача может быть существенно упрощена. Период индукции — это время, в течение которого развивается предвзрывной саморазогрев системы; при экспоненциальной зависимости скорости реакции от температуры процесс тепловыделения сначала идет медленно и почти не влияет на течение среды, разложиться при этом успевает лишь небольшая доля ударно сжатого вещества [6]. Поэтому в первом приближении можно пренебречь влиянием кинетики на газодинамику среды и считать, что идущая в веществе реакция не влияет на течение в волне за время порядка периода индукции. К концу периода индукции вещество имеет давление, плотность, скорость звука и массовую скорость такие же, как если бы реакция в веществе не имела места. Наличие реакции сказывается только на температуре вещества.

Связь давления и плотности в волне разгрузки для ряда жидкостей может быть выражена следующей зависимостью [7, 8]:

$$p = p_0 + A\left[\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^n - 1\right].$$

Это так называемое уравнение «обобщенной» изэнтропы, где $A(s)$ — функция энтропии, а показатель n в широком диапазоне давлений — величина постоянная; p_0, ρ_0 — давление и плотность во фронте ударной волны; $A = \frac{\rho_0 c_0^2}{n}$, где c_0 — скорость звука ударно сжатого вещества. Все течение в волне разгрузки может быть определено, если известна массовая скорость $u_{\text{раз}}$:

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \left(1 - \frac{n-1}{2}\,\frac{u_{\text{раз}}}{c_0}\right)^{\frac{2}{n-1}};$$

$$\frac{c}{c_0} = \left(1 - \frac{n-1}{2}\,\frac{u_{\text{раз}}}{c_0}\right);$$

$$p = p_0 + \frac{\rho_0 c_0^2}{n}\left[\left(1 - \frac{n-1}{2}\,\frac{u_{\text{раз}}}{c_0}\right)^{\frac{2n}{n-1}} - 1\right].$$

Законы термодинамики позволяют получить связь температуры вещества в волне разгрузки с плотностью $T = T_0\left(\frac{v_0}{v}\right)^{\gamma}$, здесь T_0, v_0 — температура и удельный объем вещества во фронте ударной волны, а γ — коэффициент Грюнайзена.

Прирост температуры вещества за счет реакции равен $\Delta T = \int\limits_0^t \frac{Qz}{c\rho} e^{-E/RT}$ (Q — тепловой эффект реакции; z — предэкспоненциальный множитель в аррениусовском законе; c — теплоемкость ударно сжатого вещества; E — энергия активации).

Уравнение теплового баланса вещества в интегральной форме имеет вид

$$T = T_0\left(\frac{v_0}{v}\right)^{\gamma} + \int\limits_0^t \frac{Qz}{c\rho} e^{-E/RT}\,dt.$$

Для треугольного профиля массовой скорости за фронтом ударной волны, изменение массовой скорости произвольного элемента вещества во времени может быть записано

$$u = u_0 - u_{\text{раз}} = u_0\left(1 - \frac{t}{\delta}\right),$$

где u_0 — массовая скорость во фронте ударной волны; δ — длительность волны, или время действия ее, за это время волна разгрузки приобретает массовую скорость, равную u_0, и суммарная скорость за ударной волной станет равной нулю.

Уравнение теплового баланса в безразмерных величинах, принятых в теории нестационарного теплового взрыва [7], записывается как

$$\theta = \frac{E}{RT_0}\left[\left(1 - \frac{n-1}{2}\frac{u_0}{c_0}\frac{t}{\delta}\right)^{\frac{2\gamma}{n-1}} - 1\right] + \int_0^t \frac{e^\theta}{\tau}\,dt,$$

где $\theta = \frac{E}{RT_0^2}(T - T_0)$ — безразмерный разогрев вещества; $\tau^{-1} = \frac{Qz}{c\rho}\frac{E}{RT_0^2}e^{-E/RT_0}$ — медленно меняющаяся функция во времени, так как c и ρ — переменные величины; при постоянных c и ρ τ равно периоду индукции адиабатического теплового взрыва τ_0 в условиях протекания реакции, когда объем вещества не меняется.

Начальные условия: $t=0$, $\theta=0$.

Разложение функции θ в ряд Тейлора в окрестности точки $\theta=0$ по степеням малой величины t/δ с точностью до третьего члена дает

$$\theta = \left[\frac{\delta}{\tau_0} - \gamma\frac{u_0}{c_0}\frac{E}{RT_0}\right]\frac{t}{\delta} + \frac{1}{2}\left[\frac{\delta}{\tau_0} - \gamma\frac{u_0}{c_0}\frac{E}{RT_0} - \right.$$
$$\left. - \frac{u_0}{c_0}\frac{n-1-2\gamma}{2}\right]\cdot\left[\frac{\delta}{\tau_0} + \frac{u_0}{c_0}\frac{n-1-2\gamma}{2}\right]\left(\frac{t}{\delta}\right)^2.$$

Здесь не принимается во внимание изменение τ во времени.

Если θ — положительная величина, имеет место увеличение температуры, что приводит к ускорению реакции. Таким образом, взрыв может иметь место, если

$$\frac{\delta}{\tau_0} > \frac{u_0}{c_0}\left(\gamma\frac{E}{RT_0} + \frac{n-1-2\gamma}{2}\right).$$

Для обычных взрывчатых веществ, у которых наблюдается сильная зависимость скорости реакции от температуры, энергия активации велика и следует ожидать, что $\frac{n-1-2\gamma}{2} \ll \gamma\frac{E}{RT_0}$, так что вторым членом в скобке можно пренебречь.

Следует отметить, что условие возникновения взрыва является необходимым, но недостаточным, так как вблизи критической величины длительности

$$\delta_{кр} \sim \frac{u_0}{c_0}\gamma\frac{E}{RT_0}\tau_0.$$

Хотя температура в среде увеличивается, самоускорение реакции будет незначительным, время протекания реакции большим, реакция теряет взрывной характер. Ясно, что рассмотрение развития взрыва вблизи критических значений времени действия волны требует точного решения системы уравнений гидродинамики с учетом теплопроводности и кинетики.

В приближенном решении задачи об адиабатическом взрыве в условиях волны разгрузки за ударной волной под периодом индукции следует понимать время, за которое величина θ изменится от 0 до θ^*. Для случая, когда величиной $\frac{n-1-2\gamma}{2}$ можно пренебречь по сравнению с $\gamma\frac{E}{RT_0}$, период индукции

$$\frac{\tau_{\text{инд}}}{\tau_0} = \sqrt{\frac{2\theta^*\delta/\tau_0}{\delta/\tau_0 - \gamma\frac{u_0}{c_0}\frac{E}{RT_0}} + 1} - 1 \qquad (1)$$

θ^* определяется из требования: в предельном случае, когда $\delta = \infty$, т. е. профиль волны прямоугольный, период индукции адиабатической вспышки в этом случае равен τ_0. Таким образом, $\theta^* = 1{,}5$ н, окончательно имеем

$$\frac{\tau_{\text{инд}}}{\tau_0} = \sqrt{\frac{3}{1 - \gamma\frac{u_0}{c_0}\frac{\tau_0}{\delta}\frac{E}{RT_0}} + 1} - 1.$$

Этой формулой можно пользоваться, когда $\tau_{\text{инд}} \ll \delta$ и за времена $\tau_{\text{инд}}$ прореагировала незначительная доля вещества, т. е. когда $\tau_{\text{инд}}/\delta \ll 1$ и $\eta \ll 1$.

Нетрудно отметить, какая доля вещества прореагировала за времена порядка $\tau_{\text{инд}}$. Уравнение кинетики для реакции нулевого порядка

$$\frac{d\eta}{dt} = ze^{-E/RT},$$

где η — глубина реакционного превращения вещества.

В безразмерном виде

$$\frac{d\eta}{dt} = \frac{\alpha}{\tau_0}e^{\theta} \text{ или } \eta = \int_0^{\tau_{\text{инд}}} \frac{\alpha}{\tau_0}e^{\theta}\,dt,$$

где $\alpha = \frac{c\rho}{Q}\frac{RT_0^2}{E}$.

Приближенное решение уравнения кинетики дает

$$\eta = \alpha\left\{\frac{\tau_{\text{инд}}}{\tau_0} + \frac{1}{2}\left(\frac{\tau_{\text{инд}}}{\tau_0}\right)^2\left[1 - \gamma\frac{u_0}{c_0}\frac{\tau_0}{\delta}\frac{E}{RT_0}\right]\right\}.$$

Тепловой взрыв происходит при

$$\beta = \frac{RT_0}{E} \ll \text{ и } \alpha = \frac{c\rho}{Q}\frac{RT_0^2}{E} \ll 1.$$

С ростом интенсивности ударной волны параметры β и α растут, картина теплового взрыва должна вырождаться [6]. Замена истинной кинетической закономерности реакций нулевого порядка, т. е. неучет выгорания вещества, может привести к существенной ошибке в определении величины периода индукции. Интересно провести оценку точности предлагаемой формулы для периода индукции.

Температурный режим адиабатической реакции первого порядка описывается следующей системой уравнений:

$$\frac{d\theta}{d\tau} = -\gamma\frac{E}{RT_0}\frac{u_0}{c_0}\frac{\tau_0}{\delta}\left[1 - \frac{n-1}{2}\frac{u_0}{c_0}\frac{\tau_0}{\delta}\tau\right]^{(2\gamma(n-1)-1} +$$

$$+ (1-\eta)e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}}, \quad \frac{d\eta}{d\tau} = \alpha(1-\eta)e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}},$$

здесь $\tau = \frac{t}{\tau_0}$. Начальные условия $\tau=0$, $\theta=\eta=0$.

Эта система была решена на электронно-вычислительной машине для параметров:

$$\beta=0{,}0522,\ \alpha=0{,}0794,\ \frac{\tau_0}{\delta}=0{,}0282,\qquad \frac{u_0}{c_0}=0{,}343,$$

характерных для условий во фронте нормальной детонационной волны смеси нитрометан/ацетон 75/25 по объему [9]. Период индукции, определенный численно, оказался равным 1,63, а вычисленный по формуле (1) — 1,37.

Таким образом, неучет выгорания вещества приводит к ошибке в определении периода индукции порядка 20—30%.

Неучет действия волны разгрузки, идущей за фронтом ударной волны, приводит к ошибке, которая вблизи «порога инициирования» (критическое давление, при котором реакция теряет взрывной характер) может достигать огромных величин ~ 100% и более.

Поступила в редакцию
17/I 1970

ЛИТЕРАТУРА

1. A. W. Campbell, W. S. Davis, I. R. Travis. Phys. Fluids, 1961, 4, 4.
2. C. L. Mader. Phys. Fluids, 1965, 8, 10.
3. I. W. Enig, F. I. Petrone, Phys. Fluids, 1966, 9, 2.
4. И. М. Воскобойников, В. М. Богомолов, А. Л. Апин. Физика твердого тела, 1967.
5. A. N. Dremin, O. K. Pozanov, V. S. Trofimov. Combustion and Flame, 1963, 7, 2.
6. А. Г. Мержанов. Лекции по теории воспламенения. МФТИ, 1964.
7. Ф. А. Баум, К. П. Станюкевич, Б. И. Шехтер. Физика взрыва. М., Физматгиз, 1959.
8. К. П. Станюкевич. Неустановившиеся движения сплошной среды. М., Гостехиздат, 1955.
9. А. Н. Дремин, О. К. Розанов, И. Г. Коба. ФГВ, 1965, 1, 3.

УДК 534.222.2

О ТЕПЛОВЫДЕЛЕНИИ ПРИ НИЗКОСКОРОСТНОМ РЕЖИМЕ ДЕТОНАЦИИ

В. И. Ващенко, Ю. Н. Матюшин,
А. К. Парфенов, Ю. А. Лебедев, А. Я. Апин
(Москва)

Дискретность режимов детонации, т. е. стационарное распространение детонационной волны с двумя различными скоростями при изменении величины инициирующего импульса, является одним из интересных вопросов теории детонации конденсированных ВВ. Значение большей из двух стационарных скоростей (нормальная скорость) согласуется с расчетами, выполненными на основе гидродинамической теории. Значение меньшей скорости (так называемая малая скорость детонации) отличается от нормальной в несколько раз (почти в четыре раза в случае НГЦ).