

ными данными. Предложен новый набор коэффициентов уравнения состояния ВКВ, названный ВКВ-RR, который в сочетании с правильным учетом фазового состояния конденсированного углерода в ПД позволил значительно улучшить точность предсказания скорости детонации.

Приведены результаты расчетов неидеальной детонации, когда ПД находится в условиях химического, теплового и механического неравновесия. Показано, что массовая доля инертной конденсированной фазы в ПД, не находящейся в механическом равновесии с остальными ПД, может значительно отличаться в точке Чепмена — Жуге от ее содержания в исходной смеси. Поэтому в термодинамическом расчете неидеальной детонации следует использовать уравнения сохранения потоков массы химических элементов вместо уравнений массового баланса химических элементов. Отмечено, что в случае неидеальной детонации возможно использование условия Чепмена — Жуге в форме равенства скорости потока смеси ПД как целого относительно фронта детонационной волны и местной скорости звука, вычисленной с учетом неравновесных условий.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. С. А. Губин, В. В. Одинцов, В. И. Пепекин. Методы расчета равновесных термодинамических параметров и состава продуктов детонации конденсированных веществ (Препринт), Черноголовка, ОИХФ АН СССР, 1983.
2. F. J. Zeleznik, S. Gordon. *Ind. Eng. Chem.*, 1968, 60, 6, 27.
3. В. А. Борисов, С. А. Губин, В. В. Одинцов и др. *Хим. физика*, 1983, 3, 7, 1042.
4. С. А. Губин, В. В. Одинцов, В. И. Пепекин. *Хим. физика*, 1984, 3, 5, 754.
5. C. L. Mader. *Numerical Modeling of Detonation*. Berkley — Los Alamos — London: California Press, 1979.
6. М. Фингер, Е. Ли, Ф. Хелм и др. — В кн.: *Детонация и взрывчатые вещества*. М.: Мир, 1981.
7. Р. Джексон, Л. Грин, Р. Барлетт и др. Там же.
8. Ф. А. Баум, Л. П. Орленко, К. П. Станюкович и др. *Физика взрыва*. М.: Наука, 1975.
9. V. D. Cowan, W. Fickett. *Chem. Phys.*, 1956, 24, 5, 932.

Поступила в редакцию 30/IV 1986

### О МОДЕЛИ ДЕТОНАЦИИ FOREST FIRE

В. П. Копышев

(Москва)

В зарубежной литературе по детонации часто упоминается новая модель кинетики химического разложения гетерогенных взрывчатых веществ (ВВ) под названием FOREST FIRE (FF) [1]. Эта модель описана в [2]. В настоящей работе рассматриваются физические посыпки модели FF и обращается внимание на их противоречивость.

При построении модели принято четыре упрощающих предположения. Во-первых, разлагающееся ВВ, несмотря на его гетерогенность, рассматривается как однородная среда. Степень «неразложения» формально представлена одним параметром  $W$ , изменяющимся от 1 до 0. Случай  $W = 1$  соответствует исходному, неразложившемуся ВВ, а  $W = 0$  — конечному, полностью разложившемуся ВВ, т. е. продукту детонации. В модели FF термодинамические свойства ВВ представлены его уравнением состояния

$$p = p(W, v, E), \quad (1)$$

где  $p$  — давление;  $v, E$  — удельные (на единицу массы) объем и внутренняя энергия соответственно. Существенно, что уравнение состояния считается заданным, т. е. не зависящим от механизма (кинетики) разложения. Экспериментальные данные для построения уравнения состояния (1) скудны. Обычно они дают некоторые сведения только для исходного

( $W = 1$ ) или конечного ( $W = 0$ ) продукта, а для промежуточных значений  $W$  принимается та или иная формальная интерполяция. В уравнении состояния НОМ (от слова «гомогенный»), принятом авторами модели FF, интерполяция проводится по принципу равновесной смеси: считается, что ВВ — однородная мелкодисперсная смесь из двух компонентов (исходного и конечного продуктов) с одинаковыми давлениями и температурами  $T$  в каждом компоненте. Заметим, что если в исходном продукте существуют «очаги» конечного продукта, то трудно обосновать равенство температур компонентов (см. [1], с. 274, 275), поэтому уравнение состояния НОМ логично рассматривать как формальную интерполяцию между двумя пределами.

Во-вторых, скорость разложения, определяемая как

$$R = -d \ln W / dt, \quad (2)$$

где производная по времени — лагранжева, считается зависящей только от давления в лагранжевой точке:

$$R = R(p). \quad (3)$$

Заметим, что в кинетике Аррениуса, широко применяемой для описания разложения гомогенных ВВ, определенная скорость так зависит только от  $T$  в лагранжевой точке. Авторы модели FF утверждают, что ни при каком разумном выборе параметров в кинетике Аррениуса не удастся описать качественной картины распространения фронта детонационной волны в гетерогенных ВВ при огибании даже очень тупых углов ( $\sim 170^\circ$ ). Кинетика Аррениуса приводит в этих условиях к загущанию детонации, тогда как кинетика FF описывает в хорошем согласии с экспериментом сложную картину огибания детонационным фронтом любых углов (вплоть до  $90^\circ$ ).

С другой стороны, в литературе неоднократно отмечалось сильное влияние давления на скорость разложения именно в гетерогенных ВВ. В модели FF попросту постулируется, что скорость зависит только от давления, именно этот факт (а не уравнение состояния) косвенно отражает гетерогенность ВВ.

По-видимому, модель FF разумно применять в области давлений 30—60 кбар и выше. В этих условиях она хорошо воспроизводит экспериментально измеренные критические по отношению к возбуждению детонации значения таких величин, как диаметр цилиндрического ВВ (двумерная геометрия), скорость или толщина ударника (одномерная геометрия) и тому подобное. Именно совокупность отмеченных выше фактов стимулирует изучение и практическое использование модели FF.

Представленное в [2] сопоставление расчетных и экспериментально измеренных величин может непосредственно служить эмпирическим обоснованием принятых уравнений состояния и скоростей разложения  $R(p)$  для разных ВВ. Два других предположения модели FF являются основой для расчета функций  $R(p)$ .

Модель FF полуэмпирическая. Она использует две (и только две) функции, определяемые на опытах в следующей одномерной постановке. Плоский ударник инициирует в слое ВВ ударную волну, которая распространяется по ВВ со все возрастающей скоростью. Будем отсчитывать время  $t$  и координату фронта волны  $X$  от того момента и места, когда и где скорость волны становится равной скорости нормальной детонации (после чего она остается неизменной); с течением времени положительные величины  $t$  и  $X$  убывают (начальные значения величин отмечены штрихом). В опыте измеряются  $X'$ ,  $p'$ ,  $U'$ ,  $D'$ , где  $D = dX/dt$  — скорость ударной волны,  $U$  — массовая скорость на фронте волны; последние три величины связаны тождеством:  $p = \rho_0 U D$  ( $\rho_0$  — начальная плотность ВВ). Модель FF непосредственно использует функции:

$$X' = L(p'), \quad (4)$$

реактивная адиабата Гюгонио

$$D' = F(U'). \quad (5)$$

Соотношения (4), (5) характеризуют однопараметрический ряд опытов. В каждой опытной установке все величины зависят также и от времени, поэтому  $X = X(t, p')$ ,  $p = p(t, p')$ ,  $U = U(t, p')$ ,  $D = D(t, p')$ , где  $t \leq t'$ ,  $X \leq X'$ ,  $p \geq p'$ ,  $U \geq U'$ ,  $D \geq D'$ .

Третье упрощающее предположение — «принцип единой линии», который утверждает, что приведенные выше функции не зависят от второго аргумента  $p'$ . Отсюда вытекают формулы для любого момента времени:

$$X = L(p), \quad D = F(U), \quad dX = Ddt = (dL/dp) dp. \quad (6)$$

Используя далее соотношения на фронте волны  $v = (D - U)/(U\rho_0)$ ,  $E = -U^2/2$  и уравнение состояния (1), легко получить расчетную схему для величин  $t$ ,  $X$ ,  $U$ ,  $D$ ,  $v$ ,  $E$ ,  $W$ ,  $W_t$  как функций параметра  $p$ . Здесь  $W$  — производная от  $W$  на фронте волны, но  $W/W \neq R$ , так как через фронт проходят разные лагранжевы точки. Для перехода от  $W$  к лагранжевой производной по времени  $W_t$  принимается четвертое предположение: градиент давления за фронтом волны равен нулю; в формулах перехода используются уравнения гидродинамики в лагранжевой форме (без теплопроводности). В силу второго предположения скорость разложения  $R = W_t/W$  как функция давления, полученная в конкретных условиях (на фронте ударной волны с прямоугольным профилем давления), применима в любых условиях (в любом месте за фронтом волны при любом профиле давлений).

Алгоритм расчета  $R$  следующий: дано  $p$ ; вычисляется  $U$  из уравнения  $p = \rho_0 U F(U)$  и затем  $D = F(U)$ ,  $v = (1 - U/D)/\rho_0$ ,  $E = U^2/2$ ,  $\dot{p} = -D/(dL/dp)$ ,  $\dot{U} = 1/[(dL/dp)(1 + d \ln D/d \ln U)\rho_0]$ ,  $\dot{D} = (dF/dU)U$ ,  $\dot{v} = -(dv/dU)\dot{U}$ ,  $E = U\dot{U}$ . Далее используются уравнения гидродинамики:  $v_t = U_m$ ,  $U_t = -p_m$ ,  $E_t = pv_t$ , где индекс  $t$  означает лагранжеву производную по времени ( $dt < 0!$ ), а  $m$  — производную по лагранжевой координате; на фронте волны  $dm = \rho_0 Ddt$  и  $f = f_t + \rho_0 Df_m$  ( $f$  — произвольная функция); для нулевого градиента давления  $p_m = 0$ , следовательно,  $U_t = 0$ . Продолжение алгоритма  $p_t = \dot{p}$ ,  $v_t = U_m = \dot{U}/(D\rho_0)$ ,  $E_t = -pv_t$ ; вычисляется  $W$  из уравнения (1) и далее  $W_t$  — из формулы, полученной дифференцированием (1):

$$p_t = \left(\frac{\partial p}{\partial W}\right)_{v,E} W_t + \left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_{W,E} v_t + \left(\frac{\partial p}{\partial E}\right)_{W,v} E_t$$

и, наконец,  $R = W_t/W$ . Расчетной зависимостью  $R(p)$  пользуются в области  $p_{\min} \leq p \leq p_{\max}$ , полагая  $W = 1$  при  $p < p_{\min}$ ,  $W = 0$  при  $p > p_{\max}$ . Обычно  $p_{\min}$  бывает порядка 10 кбар, а  $p_{\max}$  совпадает с давлением в точке Жуге. Для проведения гидродинамических расчетов функция  $R(p)$  может быть интерполирована любым подходящим способом.

Указанный выше алгоритм расчета  $R$  легко программируется. Он может быть дополнен программой численного интегрирования для вычисления промежутков  $t_2 - t_1$  времени, за которые давление возрастает от  $p_1$  до  $p_2$ :

$$t_2 - t_1 = - \int_{p_1}^{p_2} \left(\frac{\partial L}{\partial p}\right) \frac{dp}{D}. \quad (7)$$

Авторы модели FF интерполируют эмпирические зависимости (4) и (5) такими выражениями:

$$\ln L = A + B \ln(p' + p^*), \quad (8)$$

$$D' = C_0 + S U', \quad (9)$$

где  $A$ ,  $B$ ,  $p^*$ ,  $C_0$ ,  $S$  — подгоночные константы (обычно  $p^* = 0$ ). График функции (8) называется «диаграммой Пополато» (POP — PLOT), зави-

симось (5) — «реактивной адиабатой Гюгонио», так как на фронте ударной волны происходит мгновенное частичное разложение ВВ. Заметим, что не реактивная адиабата Гюгонио, измеряемая в условиях, когда происходит задержка разложения ВВ, описывается той же формулой (9) с тем же значением  $C_0$ , но с меньшим (на 20—30%) наклоном  $S$ .

По описанному алгоритму проведены расчеты и воспроизведены все таблицы и графики из раздела 4А монографии [2]. В разделе 4В приводятся результаты расчетов по газодинамическим программам. Обнаруженное нами противоречие разделов 4А и 4В заключается в том, что на графиках для плоских ударных волн с любым давлением  $p_\phi$  на фронте волны всегда  $W = \bar{W}_\phi = 1$ , тогда как на модели FF она должна резко уменьшаться с ростом  $p_\phi$ . Расчетные формулы из приложения А работы [2] показывают, что граничное условие  $W = W_\phi(p_\phi)$ , навязывающее мгновенное конечное разложение ВВ на фронте волны, рассчитанное в разделе 4А, не введено в задачу. По-видимому, автор [2] полагал, что введение искусственной вязкости автоматически обеспечит правильные соотношения на «размытом» фронте ударной волны, как это имеет место для инертного материала. Но только для инертного!

Заметим также, что расчеты с любой разумной кинетикой разложения ВВ показали бы, что не существует единой диаграммы Пополато, так как она зависит от материала ударника, инициирующего детонацию. Действительно, даже для толстого ударника, создающего прямоугольный профиль инициирующего давления  $p'$  (на начальной стадии процесса), последующее разложение ВВ приведет к росту давления на границе ударник — ВВ. Взрывчатое вещество начнет расширяться в сторону ударника, и скорость расширения будет зависеть от свойств материала последнего, что повлияет на значение  $L$ . Например, для алюминия  $L$  будет больше, чем для более жесткого железа.

Та конкретная газодинамика процесса, которая имела место в той конкретной диаграмме Пополато, из которой исходили авторы модели FF, неизвестна, и она произвольно заменена динамикой навязанного прямоугольного профиля (см. предположение 4).

Таким образом, в идеологии теоретического вычисления функции  $R(p)$  имеются внутренние противоречия из-за неправильной трактовки газодинамики процесса инициирования, а контрольные газодинамические расчеты, которые воспроизводили бы экспериментальные зависимости (4) и (5), заложенные в основу модели FF, не представлены в [2]. В идеологии той модели, по которой фактически проводился газодинамический счет с заданной функцией  $R(p)$ , внутренних противоречий нет: считается, что  $W$  в каждой лагранжевой точке определяется только уравнением (2) с начальным условием  $W = 1$ . Как было отмечено выше, такая модель описывает другие экспериментальные зависимости. Можно считать, что этот факт и служит непосредственным эмпирическим обоснованием счетной модели, а не модели FOREST FIRE.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Детонация и взрывчатые вещества. Сборник статей. М.: Мир, 1981.
2. Ch. L. Mader. Numerical modelling of detonations. Berkeley: University of California Press, 1979.

Поступила в редакцию 10/IV 1986