

РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ ЗОНЫ РЕАКЦИИ ГЕТЕРОГЕННЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ

Ю. А. Аминов, Н. С. Еськов, Ю. Р. Никитенко, Г. Н. Рыкованов

РФЯЦ ВНИИ технической физики, 456770 Снежинск

Для некоторых конденсированных гетерогенных взрывчатых веществ даны результаты расчетов профиля давления в зоне химических реакций плоской стационарной детонационной волны. На основе сравнения с экспериментальными данными проведена оценка пригодности рассмотренных моделей макрокинетики взрывчатых веществ для описания зоны реакции.

На сегодняшний день различными авторами предложен ряд эмпирических моделей макрокинетики детонации гетерогенных взрывчатых веществ (ВВ). Правильность выбора параметров модели обычно определялась совпадением результатов расчета с данными экспериментов по развитию детонации в ВВ. В настоящей работе на основе построенного стационарного решения проведены расчеты структуры зоны реакции плоской стационарной детонационной волны с использованием некоторых опубликованных моделей макрокинетики детонации. Полный обзор и анализ всех существующих моделей макрокинетики детонации не были целью данной статьи. Выбор моделей макрокинетики для анализа определялся доступностью конкретных числовых значений параметров моделей для ВВ, имеющих экспериментальные данные по структуре химической зоны. Проведено сравнение расчетных результатов с известными экспериментальными данными.

В классической теории детонации Зельдовича — Неймана — Дюринга плоская детонационная волна — это стационарный комплекс, состоящий из ударного фронта, зоны химических реакций и зоны продуктов взрыва (ПВ), разделенных плоскостью Чепмена — Жуге. Параметры вещества перед фронтом ударной волны: ρ_0 , $p_0 = 0$, $E_0 = 0$, $u_0 = 0$, где ρ — плотность, p — давление, E — удельная внутренняя энергия, u — массовая скорость. Параметры в зоне ПВ соответствуют точке Жуге ($\rho_{ж}$, $p_{ж}$, $E_{ж}$, $u_{ж}$). Параметры ВВ на фронте волны однозначно определяются уравнением состояния ВВ и законами сохранения на ударном разрыве, при этом удельная калорийность ВВ вычисляется по формуле $Q = E_{ж} - u_{ж}^2/2$.

Привлекая уравнение состояния Ми —

Грюнайзена для ВВ, условие адиабатичности ВВ, условия механического равновесия и аддитивности удельных объемов и внутренних энергий компонентов смеси ВВ и ПВ, определим параметры детонационной волны путем интегрирования системы одномерных уравнений газодинамики в лагранжевых координатах совместно с законом разложения ВВ. После интегрирования получим

$$\frac{d\xi(z)}{dz} = -\frac{1}{\rho_0 D} f(\xi(z), \eta(z)); \quad (1)$$

$$\frac{1}{\rho(z)} = \frac{\xi(z)}{\rho_{ВВ}(z)} + \frac{1 - \xi(z)}{\rho_{ПВ}(z)},$$

$$\begin{aligned} p_{ВВ}(\rho_{ВВ}, E_{ВВ}) &= p_{ПВ}(\rho_{ПВ}, E_{ПВ}) = \\ &= \rho_0^2 D^2 \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho(z)} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E(z) &= \xi E_{ВВ} + (1 - \xi) E_{ПВ} = \\ &= \frac{\rho_0^2 D^2}{2} \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho(z)} \right)^2 + (1 - \xi(z)) Q, \end{aligned}$$

$$p_{ВВ}(\rho_{ВВ}) = p_x(\rho_{ВВ}) + U \left(\frac{\rho_{ВВ}}{\rho_{0,x}} \right)^{\Gamma+1}, \quad (2)$$

$$E_{ВВ}(\rho_{ВВ}) = E_x(\rho_{ВВ}) + W \left(\frac{\rho_{ВВ}}{\rho_{0,x}} \right)^{\Gamma}.$$

Здесь η — совокупность параметров, описывающих состояние ВВ и ПВ в зоне реакции; D — скорость стационарной детонации; E_x и p_x — потенциальные компоненты энергии и давления; U , W — константы интегрирования; ρ_0 — начальная и $\rho_{0,x}$ — кристаллическая плотность ВВ; Γ — коэффициент Грюнайзена. Лагранжева координата z определяется из соотношения $dz/dx = \rho(x)$, где x — эйлерова координата, отсчитываемая от фронта волны. Выгорание ВВ

считаем полным, т. е. концентрация ВВ изменяется от $\xi = 1$ на фронте волны до $\xi = 0$ в зоне ПВ.

Таким образом, задача о плоской стационарной детонационной волне сводится к обыкновенному дифференциальному уравнению (1) и системе алгебраических уравнений (2). На основании полученного стационарного решения проводились расчеты одномерных профилей давления с использованием некоторых моделей кинетики детонации для различных типов гетерогенных ВВ. Для продуктов взрыва использовалось уравнение состояния типа [1, 2] в форме

$$p = p_x(\rho) + \beta\rho(E - E_x);$$

$$p_x(\rho) = \rho_0 t A \delta^{m+1} + \omega \rho_0 F \exp\left(-\frac{\omega}{\delta}\right),$$

$$E_x = \int_0^\rho \frac{p_x}{\rho^2} d\rho, \quad \delta = \frac{\rho}{\rho_{0,k}}.$$

Здесь β , t , A , ω , F — константы. Скорость детонационной волны D задается как один из параметров уравнения состояния ПВ.

Результаты расчета зоны реакции по уравнениям (1), (2) сравнивали с данными [3], где описана методика измерения и приведены результаты экспериментального определения параметров зоны реакции стационарной детонационной волны в некоторых гетерогенных ВВ.

На рис. 1 представлены данные эксперимента и результаты расчета для прессованного ТНТ с начальной плотностью $\rho_0 = 1,63 \text{ г/см}^3$.

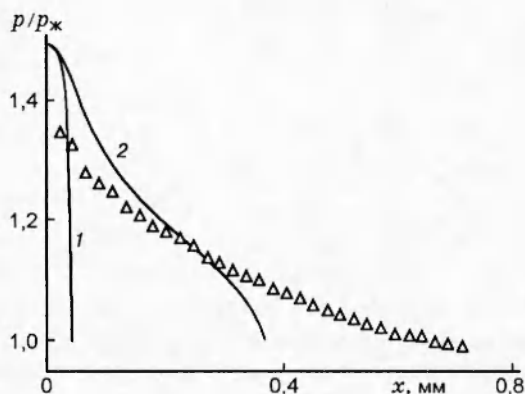


Рис. 1. Экспериментальный и расчетные профили давления для ТНТ:

1 — расчет с кинетикой [4], 2 — расчет с кинетикой [5], Δ — эксперимент [3]

Кинетика, где изменение концентрации ВВ определяется формулой

$$\frac{d\xi}{dt} = -3Cp\rho_{ВВ}(1-\xi)^{2/3} \left(\frac{4}{3}\pi N\rho_{ПВ}^{-2}\right)^{1/3},$$

$$N = N_0 p_{\Phi}^2 \exp\left(\frac{-T_a}{T_1}\right), \quad (3)$$

представлена в [4] и неплохо описывает разгон детонации в ТНТ. Здесь T_1 — температура ВВ за фронтом волны; p — текущее давление, p_{Φ} — давление на фронте волны; C , N_0 , T_a — константы. Формально при использовании выражения (3) можно получить отрицательные значения ξ , что противоречит смыслу этой величины. Поэтому в процессе счета при решении системы (1), (2) дополнительно накладывалось условие $\xi \geq 0$. Особенностью данной кинетики является также нулевая скорость реакции при $\xi = 1$.

Кривая 1 на рис. 1 построена по результатам расчета с кинетикой (3). Значения констант в (3) взяты из [4]. Значения констант уравнения состояния ПВ для ТНТ следующие: $t = 0,6$; $\beta = 0,6$; $\omega = 4,736$; $F = 67,58$; $A = 4,065$; $D = 7,05 \text{ км/с}$. Расчетная ширина зоны реакции составляет $0,038 \text{ мм}$. Видно, что ни профиль давления, ни ширина зоны реакции не соответствует данным эксперимента [3].

В работе [5] кинетика разложения ТНТ описывается эмпирическим соотношением

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = -[2,8(1,02 - \xi)(\xi + 0,2)^3 p p_{\Phi}] \cdot 10^3 \text{ [с}^{-1}\text{]}, \quad (4)$$

где p и p_{Φ} выражены в килобарах. Как и в предыдущем случае, учитывалось условие $\xi \geq 0$. Кривая 2 на рис. 1 соответствует расчету с кинетикой (4). Ширина зоны реакции здесь достаточно близка к экспериментальной, но поведение кривой давления вблизи точки Жуге отлично от эксперимента.

На рис. 2 приведены экспериментальные данные [3] для низкочувствительного пластифицированного состава на основе ТАТБ и расчетные кривые для него и его американского аналога LX-17. В работе [6] описана кинетика вида

$$\frac{d\xi}{dt} = -B \frac{\rho_{ВВ}^{1/3}}{\rho} \xi^{2/3} \exp\left(\frac{-E_a}{3E_T}\right) \left(\frac{\rho}{\rho_{ж}}\right)^n, \quad (5)$$

где константы B , E_a , n являются параметрами модели, E_T — тепловая энергия ВВ, $p_{ж}$ — давление в точке Жуге. Кривая 1 на рис. 2 представляет результаты расчета для низкочувствительного состава на основе ТАТБ [6] с

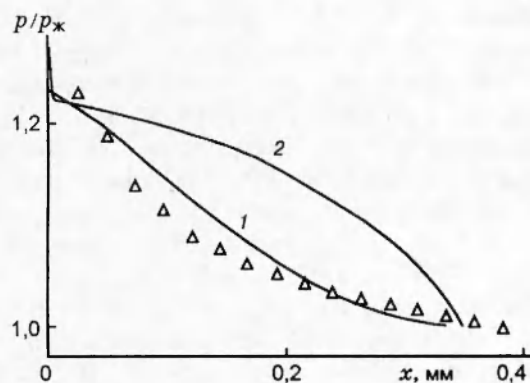


Рис. 2. Экспериментальный и расчетные профили давления для ВВ на основе ТАТБ:

1 — расчет с кинетикой [6], 2 — расчет с кинетикой [7], Δ — эксперимент [3]

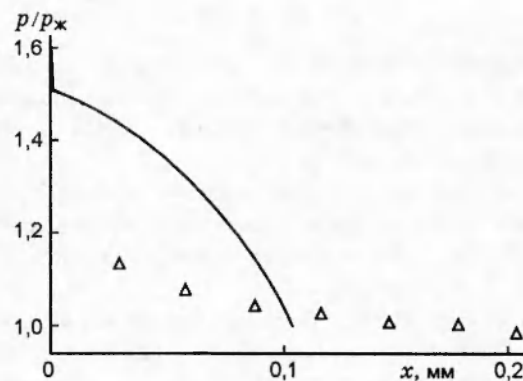


Рис. 3. Экспериментальный и расчетный профили давления для состава РВХ-9404:

линия — расчет с кинетикой [7], Δ — эксперимент [3]

кинетикой (5). Форма профиля давления и ширина зоны реакции хорошо совпадают с данными эксперимента [3].

Кривая 2 на рис. 2 соответствует расчету с моделью кинетики детонации [7]:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = -I \xi^b \left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1 - a \right)^w + G_1 \xi^c (1 - \xi)^d p^y + G_2 \xi^e (1 - \xi)^g p^r. \quad (6)$$

Константы макрокинетики для состава LX-17 взяты из работы [7]. Расчеты с этой кинетикой дают разумное значение ширины зоны реакции, но поведение кривой давления вблизи точки Жуге отлично от эксперимента. Кроме того, данная модель предполагает разложение части ВВ на фронте детонационной волны, чего нет в классической теории детонации.

На рис. 3 представлены результат расчета с моделью кинетики (6) для состава РВХ-9404 и экспериментальные данные для близкого к этому составу ВВ на основе октогена [3]. В этом расчете использованы уравнения состояния ВВ и ПВ в виде уравнения Джонса — Уилкинса — Ли с константами из [8]. Кинетические константы приведены в работе [7]. Видно, что кинетика (6) дает приемлемое значение ширины химической зоны, но неудовлетворительно описывает ход кривой давления возле точки Жуге.

Таким образом, построенное решение позволяет оценивать применимость различных моделей кинетики разложения ВВ для расчета профилей газодинамических величин в зоне реакции плоской стационарной детонационной волны. В частности, среди рассмотренных

моделей расчетная ширина зоны реакции согласуется с экспериментальной при использовании кинетических соотношений (5) и (6) для ВВ на основе ТАТБ и октогена. В то же время для соотношения (6) расчетные профили давления отличаются как от экспериментальных, так и от принятых в рамках классической теории детонации. При расчете по модели (4) наблюдается резкое падение давления в окрестности точки Жуге, что приводит к заметно меньшей по сравнению с экспериментом ширине зоны реакции ТНТ. Наконец, модель (3) для пресованного ТНТ не описывает ни ширину зоны реакции, ни профиль давления в ней.

Уравнение макрокинетики детонации определяет не только процесс разгона детонации, но и форму профилей газодинамических величин в зоне химических реакций стационарной детонационной волны. Современные экспериментальные методики с высоким временным разрешением позволяют регистрировать эти профили и использовать их для подбора эмпирических констант в уравнении макрокинетики. Поэтому расчет зоны реакции стационарной детонационной волны целесообразно использовать как одну из тестовых задач при построении моделей кинетики детонации. Так как решение обыкновенного дифференциального уравнения (1) может быть получено, в принципе, со сколь угодно заданной точностью, то стационарное решение (2) можно считать точным и использовать для калибровки гидродинамических программ, учитывающих кинетику детонации ВВ.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Жерноклетов М. В., Зубарев В. Н., Телегин Г. С.** Изэнтропы расширения продуктов взрыва конденсированных ВВ // ПМТФ. 1969. № 4. С. 127–132.
2. **Зубарев В. Н., Евстигнеев А. А.** Уравнения состояния продуктов взрыва конденсированных ВВ // Физика горения и взрыва. 1984. Т. 20, № 6. С. 114–126.
3. **Воробей В. А., Любятинский С. Н.** Исследование структуры фронта детонационных волн в конденсированных ВВ фотоэлектрическим методом // 5-е Всесоюз. совещание по детонации. Красноярск, 1991. Т. 2. С. 369–373.
4. **Баталова М. В., Бахрах С. М., Зубарев В. Н.** Возбуждение детонации в гетерогенных ВВ ударными волнами // Физика горения и взрыва. 1980. Т. 16, № 2. С. 105–109.
5. **Балинец Ю. М., Дремин А. Н., Канель Г. И.** О кинетике разложения прессованного тротила за фронтом ударной волны // Физика горения и взрыва. 1978. Т. 14, № 3. С. 111–116.
6. **Аминов Ю. А., Вершинин А. В., Еськов Н. С. и др.** Исследование ударно-волновой чувствительности пластифицированного состава на основе ТАТБ // Физика горения и взрыва. 1995. Т. 31, № 1. С. 103–108.
7. **Tarver C. M., Hallquist J. O., Erickson L. M.** Modeling short-pulse-duration shock initiation of solid explosives // 8th Symp. (Intern.) on Detonation. USA, 1985.
8. **Lee E. L., Taver C. M.** Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives // Phys. Fluids. 1980. V. 23, N 12. P. 2362.

*Поступила в редакцию 3/1 1996 г.,
в окончательном варианте — 4/XII 1997 г.*
