

## РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ ДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛН

*М. В. Баталова, С. М. Бахрах, В. Л. Загускин,  
В. Н. Зубарев*

*(Москва)*

Изложены некоторые результаты расчетов детонационных волн с конечной скоростью реакций разложения ВВ.

При распространении детонационной волны по заряду взрывчатого вещества (ВВ) согласно гидродинамической теории Я. Б. Зельдовича [1] в головной части волны выделяется зона повышенных давлений (химическая зона). Эта зона, в пределах которой происходит в основном выделение энергии, в установившемся режиме самоподдерживающейся детонации принимается стационарной и заканчивается состоянием Жуге. Состояние Жуге является фронтом последующей волны разрежения, профиль которой определяется либо разлетом продуктов взрыва (ПВ) с торца в случае одномерной детонации, либо совместным влиянием расширения ПВ с боковой и торцевой поверхностей заряда конечного диаметра.

Приближенное выражение для ширины химической зоны было получено Я. Б. Зельдовичем и А. С. Компанейцем [2]. Для обычных ВВ размеры этой зоны не превышают 0.1—1 мм [3]. При прохождении детонационной волной достаточно большого пути, намного превышающего размер химической зоны, оказывается возможным исключить из рассмотрения химическую зону и принять за фронт волны состояние Жуге. В этом случае решение будет автомодельным и может быть сравнительно просто получено, если известна изэнтропа расширения ПВ. При различных предположениях относительно изэнтропы ПВ такие решения были получены для плоских и сферически расходящихся детонационных волн [4].

Большинство разностных методов счета детонационных волн (см., например, [5]) не передают структуру детонационной волны, в частности не описывают химическую зону.

Существует, однако, много задач, в которых необходимо знание структуры химической зоны, и, следовательно, их решение должно учитывать кинетику химических реакций. К таким задачам в одномерном случае относятся инициирование ВВ ударной волной, определение процесса установления детонации и многие другие.

Одной из важных задач является определение критического диаметра ВВ. Общие представления о физической природе критического диаметра были развиты Ю. Б. Харитоном; в последующих работах приводятся приближенные решения (см., например, [6]).

Введение в расчетную схему кинетики выделения энергии за фронтом детонационных волн значительно усложняет рассмотрение, и задача может быть с достаточной полнотой решена только при помощи ЭВМ. Расчеты для одномерных волн [7-9] и двумерного течения [10, 11] показали, что этот путь является перспективным при исследовании сложных неустановившихся процессов детонации.

В данной работе изложены результаты расчетов детонационных волн по программе «Сигма» [12] в наиболее простых предположениях относительно уравнений состояния среды и кинетики разложения ВВ. Изучалось развитие детонационного процесса после кратковременного интенсивного иницирующего импульса и выход детонационной волны на стационарный режим. Часть расчетов была проведена для цилиндров ВВ конечного диаметра с целью выяснения влияния бокового разлета ПВ на структуру детонационной волны и определения пределов существования детонации.

В тексте статьи принято: время — *мксек*, расстояние — *мм*, плотность — *г/см<sup>3</sup>*, удельная энергия —  $10^{10}$  *эрг/г*, скорость —  $10^5$  *см/сек*, давление —  $10^{10}$  *дин/см<sup>2</sup>*.

1. Движение сжимаемого газа с происходящими в ней мономолекулярными и бимолекулярными химическими реакциями описывается следующей системой уравнений:

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} U = 0, \quad \rho \frac{dU}{dt} + \operatorname{grad} p = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{dE}{dt} + p \frac{d}{dt} \frac{1}{\rho} = \sum_{k=0}^N c_{0k} L_k, \quad p = p(\rho, E) \quad (1.2)$$

$$\frac{da_{\mu}}{dt} = \sum_{k=1}^N c_{\mu k} L_k, \quad L_k = s_{\mu\nu} a_{\mu} a_{\nu} \rho \quad (s_{k\mu\nu} = s_{k\mu\nu}(\rho, E)) \quad \left( \begin{matrix} \mu, \nu = 1, \dots, n \\ k = 1, \dots, N \end{matrix} \right) \quad (1.3)$$

Здесь  $\rho$ ,  $U$ ,  $p$ ,  $E$  — соответственно плотность, скорость, давление и удельная внутренняя энергия вещества;  $a_{\mu}$  — «массовая» концентрация  $\mu$ -го вещества, т. е. отношение массы данного вещества к общей массе смеси;  $c_{\mu k}$  — производительность реакции с номером  $k$  по отношению к  $\mu$ -му веществу,  $s_{k\mu\nu}$  — скорость реакции взаимодействия веществ с номерами  $\mu$  и  $\nu$ ;  $n$  — число веществ,  $N$  — число реакций,  $c_{0k}$  — калорийность реакции с номером; символ

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (U \nabla)$$

означает «материальную производную». Для численного решения системы (1.1)–(1.3) был применен метод расщепления по физическим процессам. На каждом счетном шаге по времени проводился сначала расчет движения «инертного» (нераагирующего) газа, т. е. решалась система уравнений (1.1), (1.2), причем в уравнении (1.2) отбрасывался член, отвечающий энерговыделению. Затем считалось изменение концентраций веществ и плотности внутренней энергии за счет химических реакций (вещество при этом рассматривается как неподвижное), т. е. решалась система обыкновенных дифференциальных уравнений (1.2), (1.3). На этом этапе счета в уравнении (1.2) отбрасывался второй член левой части. Этим заканчивается счет шага.

Система газодинамических уравнений решалась методом, изложенным в работе [12]. При решении системы уравнений в подвижной счетной сетке возникает задача о пересчете (интерполяции) величин на новую сетку. Массовые концентрации веществ пересчитываются на новую сетку с соблюдением закона сохранения массы каждой из компонент смеси, т. е. пересчитываются по тем же правилам, что и плотность внутренней энергии.

Система уравнений (1.2), (1.3) решалась методом, изложенным в работе [13]. В каждой счетной точке организуется цикл по реакциям. Число

актов реакции определяется следующим образом:

$$L_k = \frac{s_{k\mu\nu} a_\mu a_\nu \rho}{1 - \tau \rho s_{k\mu\nu} (a_\mu b_{\nu k} + a_\nu b_{\mu k})}, \quad b_{\mu k} = \begin{cases} c_{\mu k} & (c_{\mu k} < 0) \\ 0 & (c_{\mu k} \geq 0) \end{cases} \quad (1.4)$$

Здесь  $a_\mu$  — концентрации  $\mu$ -го вещества перед счетом  $k$ -й реакции,  $\tau$  — шаг интегрирования по времени. Далее пересчитывается внутренняя энергия

$$E^{n+1} = E^n + \tau c_{0k} L_k \quad (1.5)$$

и концентрация веществ, участвующих (реагирующих и образующихся) в данной реакции

$$a_\nu^{n+1} = a_\nu^n + \tau c_{\nu k} L_k \quad (1.6)$$

Схема имеет первый порядок точности; обладает свойствами балансности и монотонности. Можно показать, что при такой организации счета концентрации будут всегда неотрицательными. Вследствие этого шаг по времени, с которым интегрируется система (1.2), (1.3), можно брать довольно крупным; он совпадает с шагом интегрирования системы газодинамических уравнений.

2. Применение динамических методов исследования свойств веществ при высоких давлениях [14] позволило получить достаточно надежные сведения об уравнениях состояния ПВ и ВВ в области детонационных явлений. Детальное описание накопившегося экспериментального материала требует довольно сложных уравнений состояния [15]. Напротив, кинетика химических реакций за фронтом детонационных волн не исследована. Практически во всех работах [7, 10, 11] для скорости химических реакций принимается зависимость Аррениуса. Аррениусовский закон для скорости химических реакций принят и в данной работе.

Целью расчетов было получение качественной картины развития детонации; в соответствии с упрощенными представлениями о кинетике использовалось наиболее простое уравнение состояния идеального газа для ВВ и ПВ; зависимость  $p = p(\rho, E)$  принималась в виде

$$p = (\gamma - 1) \rho E$$

Если принять  $E = c_v T$ , то уравнения кинетики разложения ВВ (1.2), (1.3) могут быть записаны в виде

$$\frac{da}{dt} = -\nu a \rho \exp\left(\frac{-E_a}{E}\right) = -L, \quad \frac{dE}{dt} = qL \quad (2.1)$$

Здесь  $a$  — концентрация ВВ,  $E_a$  — энергия активации,  $q$  — калорийность ВВ.

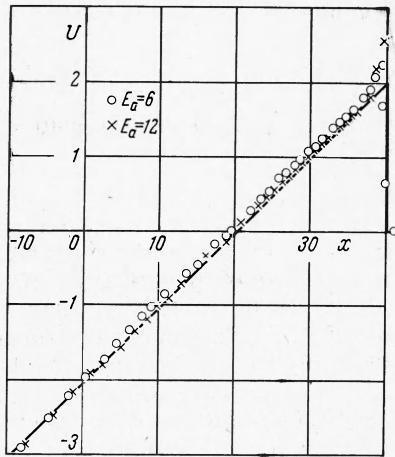
В уравнении состояния принималось  $\gamma = 3$  для получения степеней сжатия на детонационном фронте, обычно реализующихся в конденсированных ВВ.

В первой серии расчетов исследовался выход плоской детонационной волны на режим классической теории, отвечающий мгновенному энерговыделению за ударным фронтом. В расчете это осуществлялось соответствующим заданием параметров  $\nu$  и  $E_a$  в уравнении (2.1). На фиг. 1 представлен профиль  $(U, x)$  при  $E_a = 6$  и 12 и  $\nu = 10^8$  на момент времени  $t = 5$ . В этом и основной части других расчетов в области размером 0,6 мм в начальный момент времени принималось

$$\rho = 2, \quad p = 32, \quad U = 4, \quad a = 1$$

При  $x \geq 0.6$  полагалось  $\rho = 1$ ,  $p = 0$ ,  $U = 0$ ,  $a = 1$  и при  $x < 0$  — вакуум.

Как показывают результаты расчетов, при значениях  $\nu = 10^8$  и  $E_a = 6$  получается достаточно хорошее совпадение с аналитическим решением (жирная линия на фиг. 1), отвечающим мгновенному энерговыделению. Изменение  $\nu$  в широких пределах (от  $10^8$  до  $10^{10}$ ) не сказывается существенно на распределении величин.



Фиг. 1

3. Для определения структуры химической зоны в методику счета были внесены следующие изменения. При счете газодинамических величин кроме квадратичной счетной вязкости Неймана — Рихтмайера была введена линейная вязкость

$$\varepsilon = \alpha C^2 \frac{dp}{dt} \tau \quad (3.1)$$

Здесь  $C$  — скорость звука,  $\alpha$  — счетный параметр.

Введение линейной вязкости позволило ликвидировать немонотонности в профилях величин за фронтом волны. Коэффициент  $\alpha$  выбирался таким, чтобы погрешность, связанная с введением

линейной вязкости, не превышала 1—3%.

Следующее изменение в описанной выше схеме связано с тем, что кинетика включалась лишь за фронтом ударной волны. Положение фронта ударной волны определялось по максимуму счетной вязкости. Такая задержка включения кинетики позволила разделить зону нарастания давления во фронте и зону горения.

Перед детонационной волной полагалось  $E = 0$ ,  $U = 0$ ,  $\rho = 1$ . Теплота взрыва принималась равной 4. При таких условиях параметры в нормальной детонационной волне по гидродинамической теории следующие:  $p^* = 32$ ,  $\rho^* = 2$ , а в состоянии Жуге  $p_J = 16$ ,  $\rho_J = 4/3$ . Приведенные характеристики близки к детонационным параметрам мощных ВВ, таких как гексоген, тэн. Это позволяет надеяться, что полученные расчетные результаты и выводы о профиле химической зоны и развитии детонационного процесса могут быть применены к некоторым конденсированным взрывчатым составам.

Константы, входящие в (2.1), были приняты равными  $E_a = 6$  и  $\nu = 40$ . Эти значения выбирались из условия примерного равенства характерного времени химической реакции в расчетах и в эксперименте.

При упрощенном описании адиабаты ВВ можно ожидать правильного определения скорости химических реакций в узком интервале давлений, создаваемых ударной волной. Поэтому амплитуда инициирующего импульса задавалась по величине равной амплитуде химического пика в установившемся режиме.

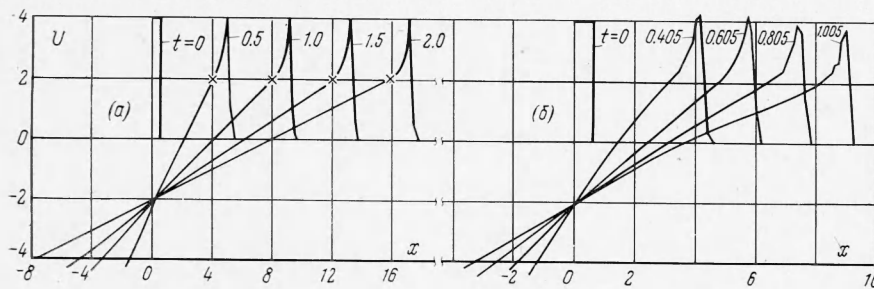
Строго говоря, при выбранном законе кинетики (2.1), установившийся режим с постоянной шириной химической зоны на конечных расстояниях не реализуется, поскольку завершению реакций отвечает бесконечное время. Вместе с тем очевидно, что при амплитуде волны, сжимающей ВВ, близкой к предельному значению гидродинамической теории, зона энерговыделения будет примерно постоянной. Естественно принять за границу химической зоны плоскость, в которой выполняется условие

Жуге  $D = U + C$ . Конечный размер химической зоны при этом получается из-за неполного энерговыделения. Фактически в расчетах плоскость, которая в дальнейшем будет называться плоскостью Жуге, определялась из условия  $U + C = 8$ . Для этого в каждой счетной точке вычислялась величина  $\Delta = 8 - (U + C)$ . Находились две точки (где «невязка» минимальна и разных знаков); давление и другие величины в точке Жуге определялись по значению в этих двух точках интерполяцией по невязкам

$$B_J = \frac{|\Delta_+| B_- + |\Delta_-| B_+}{|\Delta_+| + |\Delta_-|} \quad (3.2)$$

На фиг 2, а представлен профиль  $(u, x)$  в плоской детонационной волне в моменты времени  $t = 0.5, 1.0, 1.5, 2.0$ .

На этой фигуре изображена также величина инициирующего импульса и помечены состояния Жуге.



Фиг. 2

Фиг. 2, а показывает качественное соответствие процесса развития детонации схеме, которая следует из гидродинамической теории. Распределение параметров в области между фронтом ударной волны и точкой Жуге, хотя и не является стационарным, меняется со временем все же значительно слабее, чем в последующей волне разрежения за точкой Жуге.

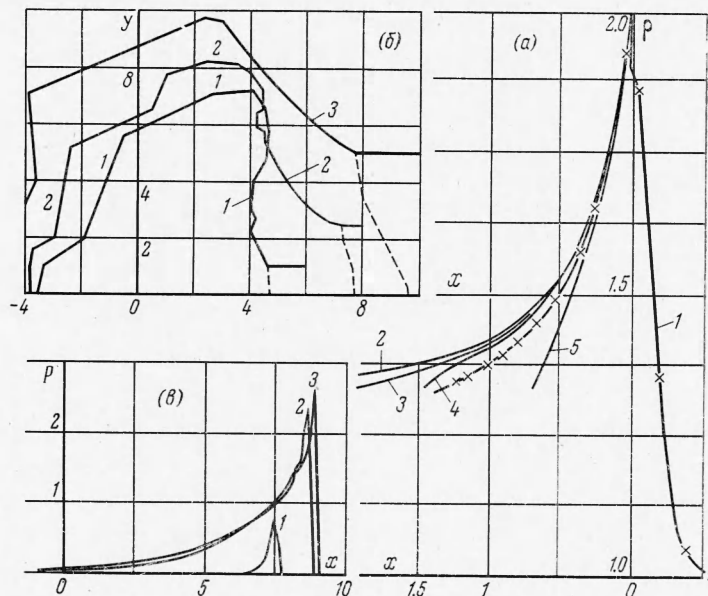
В расчетных кривых  $p(x)$  наблюдалось некоторое превышение давления (на 5—8%) на фронте ударной волны над максимальным давлением гидродинамической теории. Оно появляется вследствие расщепления в расчетах процессов движения вещества и выделения химической энергии и при уменьшении счетного шага величина избыточного давления уменьшается линейным образом.

Анализ изменений давления в точке Жуге в зависимости от расстояний, проходимых детонационным фронтом, показал, что независимо от величины инициирующего импульса, интенсивность которого изменялась на  $\pm 40\%$ , давление в точке Жуге не отличается более, чем на 1% от давления в установившемся режиме уже после прохождения детонационной волной расстояний 10 длин, характерных для химической зоны. На более ранних стадиях максимальная величина этих отклонений  $\Delta p/p_J = 10,3$  соответственно при  $t = 0.2, 0.4$ .

При этом в интервале расстояний, на которых проводились расчеты, наблюдалось заметное увеличение химической зоны с расстоянием. Ширина химической зоны по мере распространения волны увеличивалась от 0.6 ( $t = 0$ ) до 0.9 ( $t = 0.5$ ), 1.1 ( $t = 1.0$ ) и 1.3 ( $t = 2.0$ ). Увеличение ширины химической зоны приводит к тому, что давление при движении детонационной волны растет в любой точке, находящейся на фиксированном расстоянии от фронта.



На фиг. 3, а дано сравнение профиля плотности в химической зоне детонационной волны, прошедшей путь  $\sim 12$  мм (кривая 1), с профилями в установившемся режиме, отвечающими разным степеням выгорания: непрореагировавшее вещество составляет 0.01, 0.1, 0.3, 10% в точке Жуге кривых 2, 3, 4, 5.



Фиг. 3

Определение стационарного распределения параметров в химической зоне проводилось по методу [2].

Приводим значения концентраций ВВ по расчетам при выгорании в точках Жуге в различные моменты времени

$t = 0.2$	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2	1.4	1.6
$n = 1.498$	0.892	0.562	0.472	0.438	0.385	0.323	0.323

Как видно из фиг. 3, а, в волне, прошедшей расстояние в 10 длин, характерных для химической зоны, распределение плотностей достаточно близко установившемуся режиму.

4. При расчетах детонации цилиндрических зарядов (диаметром 2, 5, 10 мм) заряд инициировался с торцевой стороны импульсом такой же амплитуды, как и в одномерных расчетах (фиг. 2, а).

Разлет продуктов взрыва в вакуум происходил как с торцевой, так и с боковой поверхности заряда. Ширина химической зоны в расчетной области составляла, как отмечалось выше,  $\sim 1$  мм. Форма границ и положение ударного фронта представлены на фиг. 3, б в момент времени  $t = 1$ . Для цилиндрического заряда диаметром 10 мм наблюдается выход на самоподдерживающийся режим. На фиг. 2, б представлен профиль ( $U, x$ ) на оси заряда в начальные моменты времени.

К моменту времени  $t = 0.5$  до оси доходит разгрузка с боковой поверхности заряда. Хотя после этого момента характер распределения величин вдоль оси не меняется, скорость их изменения, как и следовало ожидать, возрастает по сравнению с одномерным случаем. Уменьшаются также пиковые значения параметров.

Дополнительные расчеты до времени  $t = 3.0$  (которые проводились с меньшим числом точек) позволяют сделать вывод, что процесс выходит на самоподдерживающийся режим.

На фиг. 3, в представлены профили давления для различных слоев заряда на момент времени  $t = 1$  (наружный слой — кривая 1; ось цилиндра — кривая 3). Четко видно падение давления от оси к периферии заряда.

Расчет детонации цилиндрического заряда диаметром 2 мм (фиг. 3, б, кривая 1) показал, что при заданной кинетике этот диаметр является подкритическим: из-за бокового разлета детонация затухает, выгорания ВВ не происходит и по заряду с некоторого момента распространяется ударная волна.

Диаметр 5 мм (фиг. 3, б, кривая 2) оказался близким к критическому. В этом случае скорость детонационной волны меньше нормальной; замечается отставание фронта горения от ударного фронта. Полученные результаты по расчету критических диаметров цилиндрических зарядов находятся в соответствии с критерием Ю. Б. Харитона.

5. Приведенные результаты расчетов показывают, что развитие детонационного процесса с помощью разработанной программы может быть исследовано достаточно подробно. Даже при сильно упрощенном описании свойств ВВ и кинетики разложения рассчитанные характеристики детонации и обнаруженные закономерности вполне реальны.

Поэтому можно надеяться, что выбор более точных уравнений состояния и реальной, согласующейся с экспериментом кинетики позволит расчетным путем исследовать разнообразные стороны детонационного явления и получать надежные количественные данные.

Из расчетов одномерной детонации следует, что уже при малых расстояниях, проходимых волной, наблюдается качественное соответствие с гидродинамической теорией, а при больших (малой ширине химической зоны) — неплохое количественное согласие.

Процесс двумерного течения за фронтом детонационной волны в зарядах конечного диаметра более сложен. В этом случае не исключено, что расчетами могут быть выявлены особенности, которые трудно предсказать на основе упрощенных представлений.

Поступила 30 XI 1970

#### ЛИТЕРАТУРА

1. З е л ь д о в и ч Я. Б. К теории распространения детонации в газообразных системах. ЖЭТФ, 1940, т. 10, вып. 5.
2. З е л ь д о в и ч Я. Б., К о м п а н е е ц А. С. Теория детонации. М., Гостехиздат, 1955.
3. З у б а р е в В. Н., П а н о в Н. В., Т е л е г и н Г. С. О ширине стационарной зоны в детонационных волнах. Физика горения и взрыва, 1970, т. 6, № 1.
4. З е л ь д о в и ч Я. Б. О распределении давления и скорости в продуктах детонационного взрыва, в частности, при сферическом распространении детонационной волны. ЖЭТФ, 1942, т. 12, вып. 9.
5. Б у с у р и н а Л. Н., Г о л ь д и н В. Я., К а л и т к и н Н. Н., Ц а р е в а Л. С. Численный расчет детонации. Ж. вычислит. матем. и матем. физ., 1970, т. 10, № 1, стр. 239—243.
6. E v a n s M. W. Detonation sensibility and failure diameter in homogeneous condensed materials. J. Chem. Phys., 1962, vol. 36, No. 1.
7. H u b b a r d H. W., J o h n s o n M. H. Initiation of detonations. J. Appl. Phys., 1959, vol. 30, No. 5.
8. Б и ш и м о в Е., К о р о б е й н и к о в В. П., Л е в и н В. А., Ч е р н ы й Г. Г. Одномерные нестационарные течения горючей смеси газов с учетом конечной скорости химических реакций. Изв. АН СССР, МЖГ, 1968, № 6, стр. 7—19.
9. B o y e r M. H. Calculation of the characteristics of detonation waves in real materials. J. Appl. Phys., 1969, vol. 40, No. 2.
10. Z e r n o w L., T k a c h e n k o E. A., B r o o k s N. B., L a n s d a l e R. Z., L e w i s G. E. Application of two-dimensional computations to the study of subcritical initiation and fadeout in a homogeneous explosive. Sympos. (Internat.) Combust. 11-th Berkeley, Calif., 1966, Pittsburgh, Pa, Comb. Inst., 1967.

11. Gilinski S. M., Chernyi G. G. High velocity motion of solids in combustible gas mixtures. Междунар. коллоквиум по газодинамике взрыва и реагирующих систем, 2-й, Новосибирск, 1969 (Аннот. докл.). Новосибирск. ин-т ядерн. физ. СО АН СССР, 1969.
12. Баталова М. В., Бахрах С. М., Винокуров О. А., Загускин В. Л., Иванова Л. Н., Калманович А. И., Шиндерман И. Д. Комплекс «Сигма» для расчета задач двумерной газодинамики. Тр. Всес. семинар по численным методам механики вязкой жидкости, Новосибирск, «Наука», 1969, стр. 283—288.
13. Загускин В. Л., Сараев В. А., Кондрашов В. Е., Бахрах С. М. Об одном методе численного решения уравнений кинетики. Всес. симпозиум по горению и взрыву, 1-й (Тезисы докл.). М., «Наука», 1968.
14. Альтшулер Л. В. Применение ударных волн в физике высоких давлений. Усп. физ. н., 1965, т. 85, вып. 2.
15. Жерноклетов М. В., Зубарев В. Н., Телегин Г. С. Изэнтропы расширения продуктов взрыва конденсированных ВВ. ПМТФ, 1969, № 4.