

УДК 544.454.3:534.222.2

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИ СОГЛАСОВАННАЯ МОДЕЛЬ ДЕТОНАЦИИ ТВЕРДЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ

Н. Zheng¹, М. Yu^{2,3}¹Институт прикладной физики и вычислительной математики, 100094 Пекин, КНР²Пекинский университет, 100871 Пекин, КНР, yu_ming@iapcm.ac.cn³Ведущая национальная лаборатория вычислительной физики, Институт прикладной физики и вычислительной математики, 100083 Пекин, КНР

Предложена усовершенствованная термодинамически согласованная модель реагирующего течения для исследования гидродинамической детонации твердых взрывчатых веществ. В предположении, что химическая смесь, состоящая из твердых реагентов и газообразных продуктов реакций, может достичь механического равновесия, но не достигает температурного равновесия, твердые реагенты и газообразные продукты реакции могут иметь общие давление и скорость, но разные температуру и внутреннюю энергию. С помощью закона сохранения энергии смеси и эквивалентности давления между составляющими выведены закон сохранения внутренней энергии и эволюционные уравнения для объемной концентрации реагентов твердой фазы и давления химической смеси. Таким образом, предложенная полная система уравнений, описывающая процесс детонации, включает в себя: законы сохранения массы, импульсов и полной энергии и эволюционное уравнение для давления химической смеси в целом, а также законы сохранения массы и внутренней энергии и эволюционное уравнение для объемной концентрации твердой фазы. Теоретический анализ выявил существенные различия между структурой стационарной детонационной волны, полученной по предложенной модели и по модели детонации Зельдовича — Неймана — Дёринга. Результаты численных расчетов типичных задач детонации показали, что модель хорошо воспроизводит важные характеристики детонационных течений, что также доказывает обоснованность предложенной модели детонации твердых взрывчатых веществ.

Ключевые слова: детонационная модель, твердые взрывчатые вещества, термодинамическая согласованность, термодинамическая неравновесность.

DOI 10.15372/FGV20200506

ВВЕДЕНИЕ

Детонация твердых взрывчатых веществ представляет собой в высокой степени сопряженный и чрезвычайно сложный процесс взаимодействия между химической кинетикой и динамикой жидкости. Ранняя теория Чепмена — Жуге (ЧЖ) [1, 2] упрощенно описывает детонацию как сильный разрыв, а химические реакции моделируются с помощью источника члена, который добавлен в уравнение закона сохранения полной энергии в области разрыва. Простота теории ЧЖ не позволяет получить представление о структуре

детонации, которая отвечает за инициирование детонации, распространение, ослабление и срыв, поэтому была построена модель Зельдовича — Неймана — Дёринга (ЗНД) [3, 4], которая принимает во внимание эффекты конечных скоростей реакций и внутреннюю структуру детонационной волны. В модели детонации твердых взрывчатых веществ ЗНД химическая смесь состоит из твердофазных реагентов и газообразных продуктов, которые идеально перемешаны и достигают состояния локального термодинамического равновесия, т. е. каждый компонент в зоне химической реакции имеет одинаковую скорость, давление, температуру или внутреннюю энергию. В настоящее время теория ЧЖ и модель ЗНД широко применяются для расчета детонационных течений твердых взрывчатых веществ [5]. Известно, что модель ЗНД берет начало из газовой детонации, в которой молекулярные столкновения настоль-

© Zheng H.¹, Yu M.^{2,3}, 2020.

¹Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, 100094, Beijing, P. R. China. ²Center of Applied Physics and Technology, Peking University, 100871, Beijing, P. R. China. ³National Key Laboratory for Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, 100083, Beijing, P. R. China.

ко интенсивны, что предположение об идеальном смешении или термодинамическом равновесии между различными составляющими является правомерным [6]. Однако в случае детонации твердых взрывчатых веществ с превращением твердофазных реагентов в газообразные продукты ключевым элементом взрывного инициирования является так называемая горячая точка [7, 8]. В ней макромасштабные кристаллы взрывчатых веществ разлагаются на мезомасштабные частицы, которые, в свою очередь, производят микромасштабные частицы взрывчатых веществ с поверхностным горением, и именно многомасштабное и многоматериальное взаимодействие делает предположение о термодинамическом равновесии неправомерным. Твердофазные реагенты и газообразные продукты в зоне химической реакции должны быть механическими равновесными и тепловыми неравновесными [9–16], они могут иметь одно давление и скорость, но две температуры или внутренние энергии.

Для описания термического неравновесия между составляющими требуются дополнительные уравнения для твердофазных реагентов. С помощью гипотезы (правила) смешения, заключающейся в том, что химическая смесь сохраняет свою внутреннюю энергию и обладает уникальным давлением, можно вывести уравнение сохранения внутренней энергии и объемной доли для твердофазных реагентов, а также можно получить уравнение эволюции давления химической смеси. Таким образом, полная система определяющих уравнений модели детонации твердых взрывчатых веществ включает в себя уравнения сохранения массы, импульса, полной энергии и эволюционное уравнение для давления химической смеси, а также закон сохранения массы и эволюционные уравнения для внутренней энергии и объемной доли для твердофазных реагентов. Как и традиционная модель ЗНД, разработанная модель детонации основана на предположении механического равновесия смеси и конечности скоростей химических реакций, поэтому можно назвать ее «термодинамически согласованная модель детонации ЗНД» (ТСЗНД). Подробный вывод модели ТСЗНД приведен в § 1. В § 2 описаны структура стационарной детонационной волны, полученная с помощью модели ТСЗНД, и ее отличие от структуры, полученной по модели ЗНД. В § 3 представлены метод приближенного решения уравнений модели ТСЗНД и

примеры численного решения задач детонации.

1. ВЫВОД ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИ СОГЛАСОВАННОЙ МОДЕЛИ ДЕТОНАЦИИ

Приведем определения физических переменных химической смеси. Внутри контрольного объема химическая смесь состоит из твердофазных реагентов и продуктов газовой фазы, физические переменные которых будем обозначать индексами s и g . Следовательно, имеются плотности ρ_s и ρ_g , внутренние энергии e_s и e_g , давления p_s и p_g , скорости u_s и u_g , удельные объемы τ_s и τ_g и объемные доли f_s и f_g , для которых справедливо тождество $f_s + f_g = 1$. Удельное тепловыделение q обусловлено изменением массы в результате химической реакции и градиентом температуры из-за тепловой неравновесности. Плотность, внутренняя энергия и удельный объем химической смеси могут быть определены из уравнений:

$$\rho = \rho_s f_s + \rho_g f_g, \quad (1.1)$$

$$e = \frac{\rho_s f_s}{\rho} e_s + \frac{\rho_g f_g}{\rho} e_g - \frac{\rho_g f_g}{\rho} q, \quad (1.2)$$

$$\tau = \frac{\rho_s f_s}{\rho} \tau_s + \frac{\rho_g f_g}{\rho} \tau_g = \frac{f_s}{\rho} + \frac{f_g}{\rho}. \quad (1.3)$$

Если внутри контрольного объема твердофазные реагенты и газообразные продукты достигают состояния механического равновесия, выполняются следующие соотношения эквивалентности:

$$p = p_s = p_g, \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}_s = \mathbf{u}_g. \quad (2)$$

В состоянии механического равновесия стандартная модель, описывающая движение невязкой сжимаемой реагирующей двухкомпонентной смеси без учета теплопроводности, включает в себя уравнения Эйлера для химической смеси и уравнения сохранения массы для твердофазных реагентов. Уравнения имеют вид: закон сохранения массы смеси

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0, \quad (3.1)$$

закон сохранения импульса для смеси

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \mathbf{I}) = 0, \quad (3.2)$$

закон сохранения полной энергии смеси

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E + p) \mathbf{u} = 0, \quad (3.3)$$

а также закон сохранения массы для твердофазных реагентов

$$\frac{\partial \rho_s f_s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_s f_s \mathbf{u} = -\rho r, \quad (3.4)$$

где $E = e + \mathbf{u}^2/2$ — полная энергия на единицу массы, r — скорость химической реакции твердофазных реагентов твердых взрывчатых веществ, I — единичный тензор. Чтобы получить детерминированные решения в условиях термического неравновесия, для замыкания системы (3.1)–(3.4) применяется правило (закон) смешения, согласно которому химическая смесь сохраняет внутреннюю энергию и все компоненты обладают общим давлением.

Используя уравнения сохранения массы и импульса для смеси (3.1), (3.2), уравнение сохранения полной энергии смеси (3.3) можно преобразовать в уравнение для материальной (субстанциональной) производной внутренней энергии смеси:

$$\frac{de}{dt} + p \frac{d\tau}{dt} = 0. \quad (4)$$

Подставляя определения (1) в уравнение (4), получаем

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\rho_s f_s}{\rho} e_s + \frac{\rho_g f_g}{\rho} e_g - \frac{\rho_g f_g}{\rho} q \right) + \\ + p \frac{d}{dt} \left(\frac{f_s}{\rho} + \frac{f_g}{\rho} \right) = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Уравнение (5) также можно записать в виде

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dt} \frac{\rho_s f_s}{\rho} e_s + p \frac{d}{dt} \frac{f_s}{\rho} \right) + \\ + \left(\frac{d}{dt} \frac{\rho_g f_g}{\rho} e_g - \frac{d}{dt} \frac{\rho_g f_g}{\rho} q + p \frac{d}{dt} \frac{f_g}{\rho} \right) = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Выражения в скобках в уравнении (6) описывают изменение внутренних энергий твердофазных реагентов и газообразных продуктов реакции. Без потери общности уравнение (6) можно разложить на следующие уравнения сохранения внутренних энергий для двух составляющих [17, 18]:

$$\frac{d}{dt} \frac{\rho_s f_s}{\rho} e_s + p \frac{d}{dt} \frac{f_s}{\rho} = 0, \quad (7.1)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\rho_g f_g}{\rho} e_g + p \frac{d}{dt} \frac{f_g}{\rho} = r q. \quad (7.2)$$

Займемся выводом уравнения для твердофазных реагентов. Подставляя уравнение сохранения массы и импульса для смеси (3.1), (3.2) в уравнение (7.1), получаем

$$\begin{aligned} \frac{d \rho_s e_s f_s}{dt} + \\ + \rho_s e_s f_s \nabla \cdot \mathbf{u} + p f_s \nabla \cdot \mathbf{u} + p \frac{df_s}{dt} = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Чтобы исключить зависимую переменную f_s из уравнения (8), необходимо найти выражение для $\frac{df_s}{dt}$. Затем используются условие равенства давления в твердофазных реагентах и газообразных продуктах, а также тождество $f_s + f_g = 1$.

Без потери общности уравнение состояния применяется в виде $p_s(\rho_s, e_s)$ для твердофазных реагентов и $p_g(\rho_g, e_g)$ для газообразных продуктов реакции. С учетом равенства $p = p_s(\rho_s, e_s) = p_g(\rho_g, e_g)$ эволюционное уравнение для давления смеси записывается в виде

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\partial p_s(\rho_s, e_s)}{\partial \rho_s} \frac{d\rho_s}{dt} + \frac{\partial p_s(\rho_s, e_s)}{\partial e_s} \frac{de_s}{dt}. \quad (9)$$

Из уравнения (3.4) выводим эволюционное уравнение для плотности твердой фазы:

$$\frac{d\rho_s}{dt} = -\frac{\rho r}{f_s} - \rho_s \nabla \cdot \mathbf{u} - \frac{\rho_s}{f_s} \frac{df_s}{dt}, \quad (10)$$

а затем из (3.4) и (8) — эволюционное уравнение для внутренней энергии твердой фазы:

$$\frac{de_s}{dt} = \frac{\rho r e_s}{\rho_s f_s} - \frac{p}{\rho_s} \nabla \cdot \mathbf{u} - \frac{p}{\rho_s f_s} \frac{df_s}{dt}. \quad (11)$$

Подставляя (10), (11) в уравнение (9), получаем

$$\begin{aligned} \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial p_s(\rho_s, e_s)}{\partial \rho_s} \left(\frac{\rho r}{f_s} + \rho_s \nabla \cdot \mathbf{u} + \frac{\rho_s}{f_s} \frac{df_s}{dt} \right) + \\ + \frac{\partial p_s(\rho_s, e_s)}{\partial e_s} \times \\ \times \left(\frac{\rho r e_s}{\rho_s f_s} - \frac{p}{\rho_s} \nabla \cdot \mathbf{u} - \frac{p}{\rho_s f_s} \frac{df_s}{dt} \right). \end{aligned} \quad (12)$$

Уравнение (12) можно преобразовать в уравнение для объемной доли твердофазных реагентов:

$$\begin{aligned} \frac{df_s}{dt} = & \\ = -\rho r \left(\frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} - \frac{e_s}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} \right) / \left(\rho_s \frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} + \frac{p}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} \right) - & \\ - f_s \nabla \cdot \mathbf{u} - \left[f_s / \left(\rho_s \frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} + \frac{p}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} \right) \right] \frac{dp}{dt}. \end{aligned} \quad (13)$$

Эволюционное уравнение для объемной доли газообразных продуктов выводится аналогично процедуре, использованной для вывода (13):

$$\begin{aligned} \frac{df_g}{dt} = & \\ = \rho r \left(\frac{\partial p_g}{\partial \rho_g} + \frac{q - e_g}{\rho_g} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} \right) / \left(\rho_g \frac{\partial p_g}{\partial \rho_g} + \frac{p}{\rho_g} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} \right) - & \\ - f_g \nabla \cdot \mathbf{u} - \left[f_g / \left(\rho_g \frac{\partial p_g}{\partial \rho_g} + \frac{p}{\rho_g} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} \right) \right] \frac{dp}{dt}. \end{aligned} \quad (14)$$

Определив скорость звука в твердой и газообразной фазах как

$$c_s^2 = \frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} + \frac{p}{\rho_s^2} \frac{\partial p_s}{\partial e_s}$$

и

$$c_g^2 = \frac{\partial p_g}{\partial \rho_g} + \frac{p}{\rho_g^2} \frac{\partial p_g}{\partial e_g}$$

соответственно, запишем уравнения (13) и (14) в виде

$$\begin{aligned} \frac{df_s}{dt} = -\rho r \frac{1}{\rho_s c_s^2} \left(\frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} - \frac{e_s}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} \right) - & \\ - f_s \nabla \cdot \mathbf{u} - \frac{f_s}{\rho_s c_s^2} \frac{dp}{dt}, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \frac{df_g}{dt} = \rho r \frac{1}{\rho_g c_g^2} \left(\frac{\partial p_g}{\partial \rho_g} + \frac{q - e_g}{\rho_g} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} \right) - & \\ - f_g \nabla \cdot \mathbf{u} - \frac{f_g}{\rho_g c_g^2} \frac{dp}{dt}. \end{aligned} \quad (16)$$

Используя тождество $f_s + f_g = 1$ и суммируя уравнения (15) и (16), приходим к следующему

эволюционному уравнению для давления химической смеси:

$$\begin{aligned} \frac{dp}{dt} = -\rho r \left(\frac{f_s}{\rho_s c_s^2} + \frac{f_g}{\rho_g c_g^2} \right)^{-1} \times & \\ \times \left[\left(\frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} - \frac{e_s}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} \right) / \rho_s c_s^2 - & \right. \\ - \left(\frac{\partial p_g}{\partial \rho_g} + \frac{q - e_g}{\rho_g} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} \right) / \rho_g c_g^2 \left. \right] - & \\ - \left(\frac{f_s}{\rho_s c_s^2} + \frac{f_g}{\rho_g c_g^2} \right)^{-1} \nabla \cdot \mathbf{u}. \end{aligned} \quad (17)$$

Подставляя (17) в (15), получаем эволюционное уравнение для объемной доли твердофазных реагентов:

$$\begin{aligned} \frac{df_s}{dt} = -\rho r \left(\frac{f_s}{\rho_s c_s^2} + \frac{f_g}{\rho_g c_g^2} \right)^{-1} \times & \\ \times \left[\frac{f_g}{\rho_g c_g^2} \left(\frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} - \frac{e_s}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} \right) / \rho_s c_s^2 + & \right. \\ + \frac{f_s}{\rho_s c_s^2} \left(\frac{\partial p_g}{\partial \rho_g} + \frac{q - e_g}{\rho_g} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} \right) / \rho_g c_g^2 \left. \right] + f_s f_g \times & \\ \times \left(\frac{f_s}{\rho_s c_s^2} + \frac{f_g}{\rho_g c_g^2} \right)^{-1} \left(\frac{1}{\rho_s c_s^2} - \frac{1}{\rho_g c_g^2} \right) \nabla \cdot \mathbf{u}. \end{aligned} \quad (18)$$

После подстановки (18) в (8) закон сохранения внутренней энергии твердофазных реагентов принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_s e_s f_s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_s e_s f_s \mathbf{u} + & \\ + p \frac{f_s}{\rho_s c_s^2} \left(\frac{f_s}{\rho_s c_s^2} + \frac{f_g}{\rho_g c_g^2} \right)^{-1} \nabla \cdot \mathbf{u} = & \\ = \rho r p \left(\frac{f_s}{\rho_s c_s^2} + \frac{f_g}{\rho_g c_g^2} \right)^{-1} \times & \\ \times \left[\frac{f_g}{\rho_g c_g^2} \left(\frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} - \frac{e_s}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} \right) / \rho_s c_s^2 + & \right. \\ + \frac{f_s}{\rho_s c_s^2} \left(\frac{\partial p_g}{\partial \rho_g} + \frac{q - e_g}{\rho_g} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} \right) / \rho_g c_g^2 \left. \right]. \end{aligned} \quad (19)$$

В итоге полная система уравнений модели детонации ТСЗНД включает в себя уравнения

(3.1)–(3.4) и (17)–(19), которые представляют: законы сохранения массы, импульса, полной энергии и эволюционное уравнение для давления химической смеси, а также законы сохранения массы, импульса, полной энергии и эволюционное уравнение для давления твердой фазы.

Давление определяется непосредственно из этих уравнений, а не путем последующего вычисления из консервативных переменных. Такой подход вычисления давления обеспечивает термодинамическую согласованность, которая устраняет нефизичные колебания давления в зоне химической реакции и не требует итерационной процедуры для поддержания устойчивости решения, а также не включает в себя вычисления производных давления по консервативным переменным, которые необходимы при использовании схем дискретизации высокого порядка и, как правило, очень сложны.

2. АНАЛИЗ СТАЦИОНАРНОЙ СТРУКТУРЫ ОДНОМЕРНОЙ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ

Предположим, что детонационная волна движется с постоянной скоростью D , и свяжем систему координат с ударным фронтом детонационной волны. При этих условиях детонационное течение описывается системой одномерных стационарных уравнений. С учетом преобразования координат $\xi = x - Dt$ (x соответствует неподвижной системе координат, а ξ — локальной системе координат, связанной с фронтом ударной волны) система уравнений в частных производных (3.1)–(3.4), (17)–(19), описывающая модель детонации ТСЗНД, преобразуется в систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} (u - D) \frac{d\rho}{d\xi} + \rho \frac{du}{d\xi} &= 0, \\ (u - D) \frac{du}{d\xi} + \frac{1}{\rho} \frac{dp}{d\xi} &= 0, \\ (u - D) \frac{de}{d\xi} + \frac{p}{\rho} \frac{du}{d\xi} &= 0, \\ (u - D) \frac{d\rho_s}{d\xi} + \frac{\rho_s f_s + \rho_s \alpha}{f_s} \frac{du}{d\xi} &= \\ &= -\rho r \frac{1 - \rho_s \phi}{f_s}, \quad (20) \end{aligned}$$

$$(u - D) \frac{de_s}{d\xi} + p\beta \frac{1}{\rho_s^2 c_s^2} \frac{du}{d\xi} = \rho r \frac{e_s + p\phi}{\rho_s f_s},$$

$$(u - D) \frac{df_s}{d\xi} - \alpha \frac{du}{d\xi} = -\rho r \phi,$$

$$(u - D) \frac{dp}{d\xi} + \beta \frac{du}{d\xi} = -\rho r \varphi,$$

где

$$\alpha = f_s f_g \left(\frac{f_s}{\rho_s c_s^2} + \frac{f_g}{\rho_g c_g^2} \right)^{-1} \left(\frac{1}{\rho_s c_s^2} - \frac{1}{\rho_g c_g^2} \right),$$

$$\beta = \left(\frac{f_s}{\rho_s c_s^2} + \frac{f_g}{\rho_g c_g^2} \right)^{-1},$$

$$\begin{aligned} \phi &= \left(\frac{f_s}{\rho_s c_s^2} + \frac{f_g}{\rho_g c_g^2} \right)^{-1} \times \\ &\times \left[\frac{f_g}{\rho_g c_g^2} \left(\frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} - \frac{e_s}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} \right) / \rho_s c_s^2 + \right. \\ &\left. + \frac{f_s}{\rho_s c_s^2} \left(\frac{\partial p_g}{\partial \rho_g} + \frac{q - e_g}{\rho_g} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} \right) / \rho_g c_g^2 \right], \\ \varphi &= \left(\frac{f_s}{\rho_s c_s^2} + \frac{f_g}{\rho_g c_g^2} \right)^{-1} \left[\left(\frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} - \frac{e_s}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} \right) / \rho_s c_s^2 - \right. \\ &\left. - \left(\frac{\partial p_g}{\partial \rho_g} + \frac{q - e_g}{\rho_g} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} \right) / \rho_g c_g^2 \right]. \end{aligned}$$

В предположении, что объемная доля твердой фазы f_s является независимой переменной, с учетом обозначения $\bar{u} = D - u$ уравнения (20) можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{df_s} &= -\rho \varphi \frac{1}{\alpha \varphi - (\rho \bar{u}^2 - \beta) \phi}, \\ \frac{d\bar{u}}{df_s} &= \bar{u} \varphi \frac{1}{\alpha \varphi - (\rho \bar{u}^2 - \beta) \phi}, \\ \frac{de}{df_s} &= -\frac{p\varphi}{\rho} \frac{1}{\alpha \varphi - (\rho \bar{u}^2 - \beta) \phi}, \\ \frac{d\rho_s}{df_s} &= -\frac{(\rho_s f_s + \rho_s \alpha) \varphi + (\rho \bar{u}^2 - \beta)(1 - \rho_s \phi)}{f_s} \times \\ &\times \frac{1}{\alpha \varphi - (\rho \bar{u}^2 - \beta) \phi}, \quad (21) \end{aligned}$$

$$\frac{de_s}{df_s} = -\left[\frac{p\beta\varphi}{\rho_s^2 c_s^2} - \frac{(\rho \bar{u}^2 - \beta)(e_s + p\phi)}{\rho_s f_s} \right] \times$$

$$\times \frac{1}{\alpha\varphi - (\rho\bar{u}^2 - \beta)\phi},$$

$$\frac{dp}{df_s} = -\rho\bar{u}^2\varphi \frac{1}{\alpha\varphi - (\rho\bar{u}^2 - \beta)\phi},$$

$$\frac{d\xi}{df_s} = -\frac{\bar{u}(\rho\bar{u}^2 - \beta)}{\rho r} \frac{1}{\alpha\varphi - (\rho\bar{u}^2 - \beta)\phi}.$$

Система (21) описывает профили переменных в зоне химических реакций детонационного течения, где независимая переменная f_s изменяется в диапазоне от 1 до 0: $f_s = 1$ соответствует начальному состоянию, когда весь объем смеси состоит из твердых реагентов, и $f_s = 0$ соответствует конечному состоянию, в котором смесь состоит полностью из газообразных продуктов реакций.

Положение $f_s = 1$ соответствует фронту лидирующей ударной волны, которое называется пиком фон Неймана [5] и вычисляется по соотношению Ренкина — Гюгонно:

$$\rho_N(D - u_N) = \rho_0(D - u_0),$$

$$p_N + \rho_N(D - u_N)^2 = p_0 + \rho_0(D - u_0)^2,$$

$$e_N + \frac{p_N}{\rho_N} + \frac{1}{2}(D - u_N)^2 = e_0 + \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{1}{2}(D - u_0)^2,$$
(22)

в которых нижним индексом N обозначено состояние на фронте лидирующей ударной волны, а индексом 0 — состояние перед ее фронтом.

При заданной скорости стационарной детонационной волны D с учетом уравнения состояния твердой фазы $p = p_s(\rho_s, e_s)$ можно вычислить значения пика Неймана и затем использовать их как начальные данные для системы (21). Ниже объясняется, как получить скорость стационарной детонационной волны.

Из формулы для ширины зоны реакций детонации (последнее уравнение в системе (21))

$$\frac{d\xi}{df_s} = -\frac{\bar{u}(\rho\bar{u}^2 - \beta)}{\rho r} \frac{1}{\alpha\varphi - (\rho\bar{u}^2 - \beta)\phi}$$

следует, что, если химические реакции заканчиваются при $f_s = 0$, должно иметь место равенство $\rho\bar{u}^2 - \beta = 0$ в силу $r = 0$, и далее может

быть выведено соотношение $D = u + c_g$, которое совпадает с условием ЧЖ [5] стандартной модели ЗНД. Поэтому существует следующая линия Рэлея:

$$p = \rho_0 D^2 \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right), \quad (23)$$

направленная по касательной к кривой Гюгонно для газообразных продуктов реакций:

$$e_g - q - e_0 = \frac{1}{2\rho_0} p \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right). \quad (24)$$

С учетом уравнения состояния газовой фазы легко получить скорость стационарной детонационной волны.

Структура стационарной детонационной волны проверена для взрывчатого вещества РВХ-9502. Используются уравнения состояния

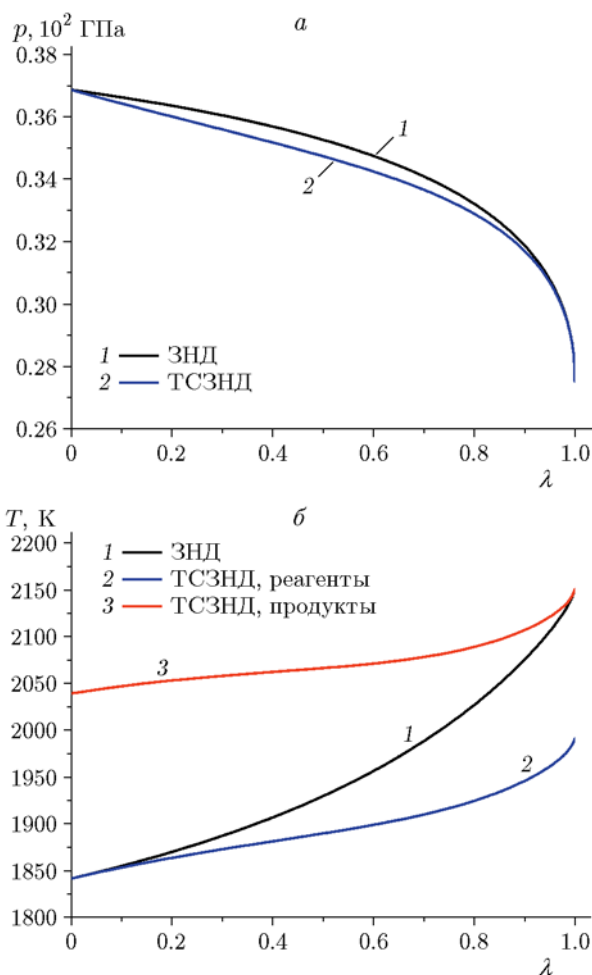


Рис. 1. Профили давления (а) и температуры (б) в зоне химической реакции при детонации твердого взрывчатого вещества РВХ-9502

Джонса — Уилкинса — Ли (JWL) [19] (система единиц измерения — сантиметры, граммы, микросекунды). Скорость химической реакции r связана с кинетикой химического разложения твердых взрывчатых веществ, здесь принята модель зажигания — роста [20].

Теоретические результаты распределения профиля давления и температуры в зоне химической реакции показаны на рис. 1, результаты сопоставлены с полученными по стандартной модели ЗНД. Видно, что хотя результаты этих двух моделей имеют одинаковую тенденцию изменения массовой доли газообразных продуктов, численные значения значительно отличаются, особенно для температуры.

3. МЕТОД РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МОДЕЛИ ДЕТОНАЦИИ И ПРИМЕРЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

3.1. Метод решения уравнений модели детонации

Система уравнений в частных производных (3.1)–(3.4), (17)–(19), соответствующая модели ТСЗНД, в двумерной декартовой системе координат может быть записана в матричном виде

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{q}) \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial x} + \mathbf{B}(\mathbf{q}) \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial y} = \mathbf{s}(\mathbf{q}), \quad (25)$$

где $\mathbf{q} = [\rho, \rho u, \rho v, \rho E, \rho_s f_s, \rho_s e_s f_s, f_s, p]^T$ — переменные состояния,

$\mathbf{B}(\mathbf{q})$ — имеет вид, аналогичный $\mathbf{A}(\mathbf{q})$, $\mathbf{s}(\mathbf{q}) = [0, 0, 0, 0, -\rho r, \rho r p \phi, -\rho r \phi, -\rho r \varphi]^T$ — источникный член, u, v — компоненты скорости.

При использовании численной схемы высокого порядка для решения системы (25), необходимы характеристические свойства якобианов $\mathbf{A}(\mathbf{q})$ и $\mathbf{B}(\mathbf{q})$. Найдены восемь собственных значений и собственных векторов матрицы $\mathbf{A}(\mathbf{q})$:

$$\lambda_1 = u - c, \quad \lambda_{2,\dots,7} = u, \quad \lambda_8 = u + c,$$

где $c = \sqrt{\beta/\rho}$. Правые собственные векторы равны:

$$r_1(\mathbf{q}) = \left[1, u + c, v, \left(E + \frac{p}{\rho} \right) + uc, \frac{\rho_s f_s}{\rho}, \frac{\rho_s e_s f_s}{\rho} + \frac{f_s}{\rho_s c_s^2} \frac{\beta p}{\rho}, -\frac{\alpha}{\rho}, c^2 \right]^T,$$

$$r_2(\mathbf{q}) = [1, u, 0, 0, 0, 0, 0, 0]^T,$$

$$r_3(\mathbf{q}) = [0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0]^T,$$

$$r_4(\mathbf{q}) = [0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0]^T,$$

$$r_5(\mathbf{q}) = [0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0]^T,$$

$$r_6(\mathbf{q}) = [0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0]^T,$$

$$r_7(\mathbf{q}) = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]^T,$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{q}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -u^2 & 2u & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -vu & v & u & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\left(E + \frac{p}{\rho}\right)u & E + \frac{p}{\rho} & 0 & u & 0 & 0 & 0 & u \\ -\frac{\rho_s f_s u}{\rho} & \frac{\rho_s f_s}{\rho} & 0 & 0 & u & 0 & 0 & 0 \\ -\left(\frac{\rho_s e_s f_s u}{\rho} + \frac{f_s}{\rho_s c_s^2} \frac{\beta p u}{\rho}\right) & \frac{\rho_s e_s f_s}{\rho} + \frac{f_s}{\rho_s c_s^2} \frac{\beta p}{\rho} & 0 & 0 & 0 & u & 0 & 0 \\ \frac{\alpha u}{\rho} & -\frac{\alpha}{\rho} & 0 & 0 & 0 & 0 & u & 0 \\ -\frac{\beta u}{\rho} & \frac{\beta}{\rho} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u \end{bmatrix},$$

$$r_8(q) = \left[1, u - c, v, \left(E + \frac{p}{\rho} \right) - uc, \frac{\rho_s f_s}{\rho}, \right. \\ \left. \frac{\rho_s e_s f_s}{\rho} + \frac{f_s}{\rho_s c_s^2} \frac{\beta p}{\rho} - \frac{\alpha}{\rho}, c^2 \right]^T.$$

Соответствующие левые собственные векторы равны:

$$l_1(q) = [-uc, c, 0, 0, 0, 0, 0, 1]/(2c^2),$$

$$l_2(q) = [c^2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1]/c^2,$$

$$l_3(q) = [0, 0, c^2, 0, 0, 0, 0, -\nu]/c^2,$$

$$l_4(q) = [u^2 c^2, -uc^2, 0, c^2, 0, 0, 0, -(E + p/\rho)]/c^2,$$

$$l_5(q) = \left[0, 0, 0, 0, c^2, 0, 0, -\frac{\rho_s f_s}{\rho} \right] / c^2,$$

$$l_6(q) = \left[0, 0, 0, 0, 0, c^2, 0, 0, \right. \\ \left. -\frac{\rho_s e_s f_s}{\rho} - \frac{f_s}{\rho_s c_s^2} p c^2 \right] / c^2,$$

$$l_7(q) = [0, 0, 0, 0, 0, 0, c^2, \alpha/\rho]/c^2,$$

$$l_8(q) = [-uc, -c, 0, 0, 0, 0, 0, 1]/(2c^2).$$

Для решения использован метод расщепления Странга [21], который разделяет (25) на два шага:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{q}) \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial x} + \mathbf{B}(\mathbf{q}) \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial y} = 0, \quad (26.1)$$

$$\frac{d\mathbf{q}}{dt} = \mathbf{s}(\mathbf{q}). \quad (26.2)$$

Для решения обыкновенного дифференциального уравнения (26.2) применяется схема Рунге — Кутты второго порядка с явно-неявной дискретизацией [22].

Гиперболическую систему уравнений в частных производных (26.1) решали методом конечных объемов второго порядка с алгоритмом распространения волны [23], который обладает хорошими разрешающими свойствами при решении неконсервативных гиперболических систем. Используемая конечно-объемная схема имеет вид:

$$\mathbf{q}_{i,j}^{n+1} = \mathbf{q}_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{A}^+ \Delta \mathbf{q}_{i,j}^n + \mathbf{A}^- \Delta \mathbf{q}_{i+1,j}^n) -$$

$$- \frac{\Delta t}{\Delta y} (\mathbf{B}^+ \Delta \mathbf{q}_{i,j}^n + \mathbf{B}^- \Delta \mathbf{q}_{i+1,j}^n) -$$

$$- \frac{\Delta t}{\Delta x} (\tilde{\mathbf{F}}_{i+1,j}^n - \tilde{\mathbf{F}}_{i,j}^n) -$$

$$- \frac{\Delta t}{\Delta y} (\tilde{\mathbf{G}}_{i,j+1}^n - \tilde{\mathbf{G}}_{i,j}^n), \quad (27)$$

$$(\mathbf{A}^\pm \Delta \mathbf{q})_{i,j} :=$$

$$:= (\mathbf{A}^\pm \Delta \mathbf{q})_{i,j} \mp \sum_{k=1}^8 \left[|\lambda_k| \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} |\lambda_k| \right) \tilde{\alpha}_k r_k \right]_{i,j},$$

$$\tilde{\mathbf{F}}_{i,j} := \tilde{\mathbf{F}}_{i,j} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^8 \left[|\lambda_k| \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} |\lambda_k| \right) \tilde{\alpha}_k r_k \right]_{i,j},$$

$$\tilde{\mathbf{G}}_{i,j+1} := \tilde{\mathbf{G}}_{i,j+1} - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} \mathbf{B}_{i,j}^+ \mathbf{A}_{i,j}^+ \Delta \mathbf{q}_{i,j},$$

$$\tilde{\mathbf{G}}_{i,j} := \tilde{\mathbf{G}}_{i,j} - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} \mathbf{B}_{i,j}^- \mathbf{A}_{i,j}^+ \Delta \mathbf{q}_{i,j},$$

$$\tilde{\mathbf{G}}_{i-,j+1} := \tilde{\mathbf{G}}_{i-,j+1} - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} \mathbf{B}_{i,j}^+ \mathbf{A}_{i,j}^- \Delta \mathbf{q}_{i,j},$$

$$\tilde{\mathbf{G}}_{i-1,j+1} := \tilde{\mathbf{G}}_{i-1,j+1} - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} \mathbf{B}_{i,j}^- \mathbf{A}_{i,j}^- \Delta \mathbf{q}_{i,j},$$

где $\mathbf{A}^\pm = R\Lambda^\pm L$, L и R — матрицы, составленные соответственно из левых и правых собственных векторов якобианов матрицы \mathbf{A} , \mathbf{A}^\pm — диагональные матрицы, содержащие неотрицательные и неположительные собственные значения якобианов матрицы \mathbf{A} , $\Delta \mathbf{q}_{i,j} = q_{i,j} - q_{i-1,j}$ и $\tilde{\alpha} = \varphi(\theta)L\Delta q$, где $\varphi(\theta)$ — ограничитель.

3.2. Моделирование примеров задач детонации

Как и в предыдущей задаче, моделирование нестационарного детонационного течения выполнено для взрывчатого вещества РВХ-9502 с использованием уравнения состояния JWL и моделей реакций инициирования роста.

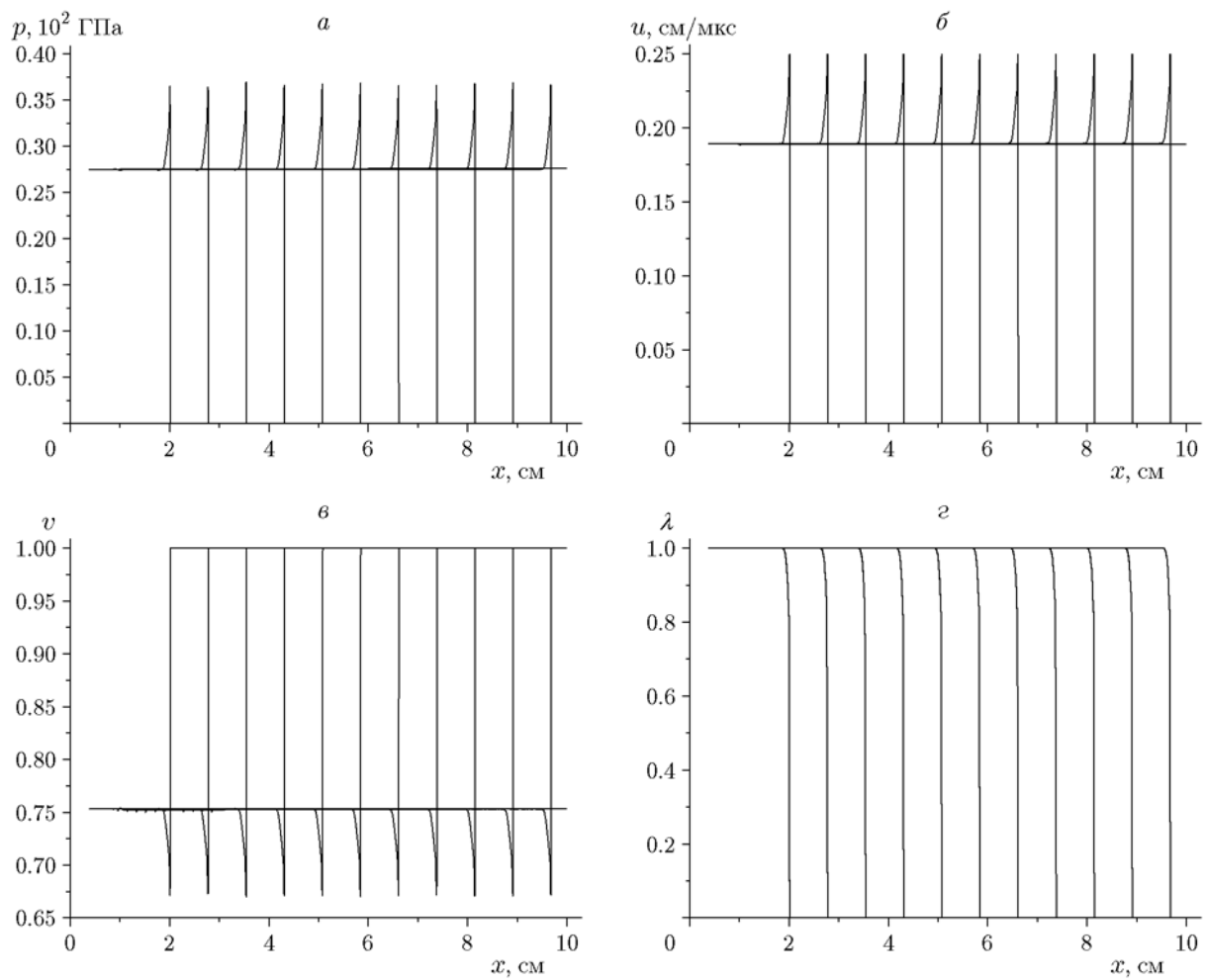


Рис. 2. Распределение расчетных физических переменных, полученных на сетке 5 ячеек/мм

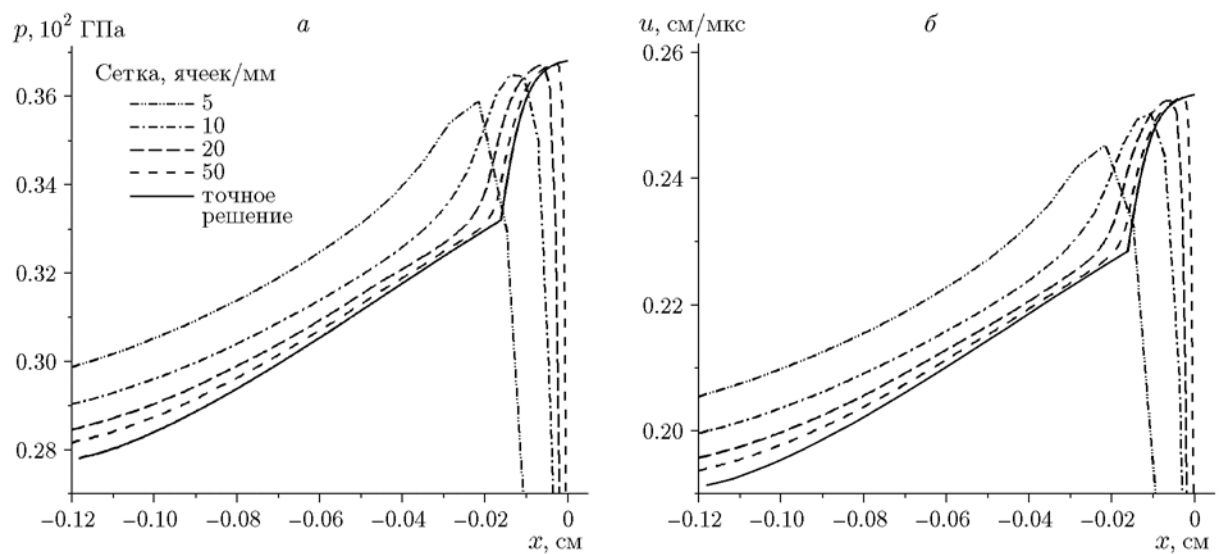


Рис. 3. Расчетные профили физических переменных в зоне химической реакции, полученные на сетках различных масштабов

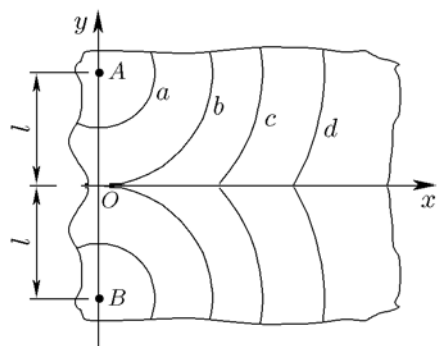


Рис. 4. Конфигурация взаимодействия двух цилиндрических расходящихся детонационных волн

3.2.1. Иницирование и распространение плоской одномерной детонационной волны

Длина образца взрывчатого вещества равна 10 см, на левом конце длиной 0.2 см поставлены условия ЧЖ. Решение получено на четырех сетках с масштабами 5, 10, 20 и 50 ячеек/мм. Для примера на рис. 2 приведены распределения давления, скорости, относительной объемной доли химической смеси и массовой доли твердой фазы, полученные численно на сетке 5 ячеек/мм в моменты времени $t = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12$ мкс. Численные результаты хорошо совпадают с теоретическим решением. Численные и теоретические

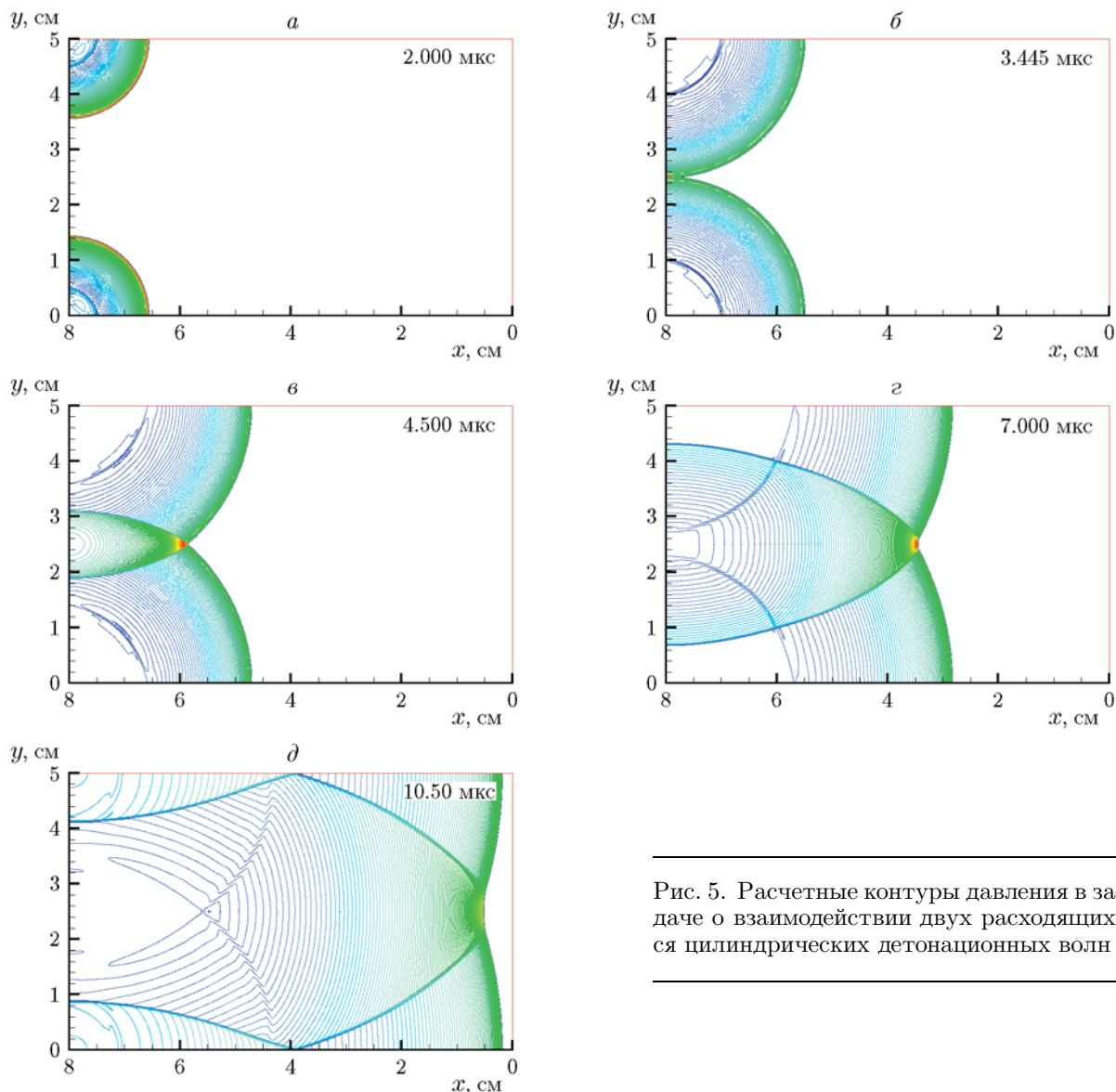


Рис. 5. Расчетные контуры давления в задаче о взаимодействии двух расходящихся цилиндрических детонационных волн

Численные и теоретические значения
характерных переменных

Ячейка/мм	V , см ³ /Г	p , 10 ² ГПа	v , см/мкс	$v_{СЛ}$, см/мкс
5	0.6793	0.3590	0.2453	0.7627
10	0.6731	0.3645	0.2503	0.7634
20	0.6707	0.3670	0.2524	0.7641
50	0.6703	0.3676	0.2529	0.7643
Теория	0.6692	0.3687	0.2537	0.7669

значения ряда важных переменных приведены в таблице, отмечается хорошее согласование. Профили стационарного давления и скорости в зоне химической реакции, полученные численно, в сравнении с теоретическими решениями показаны на рис. 3, и также следует отметить отличное совпадение.

3.2.2. Взаимодействие двух расходящихся цилиндрических детонационных волн

Конфигурация взаимодействия взрывчатых веществ от двух линейных генераторов A и B при расстоянии $2l$ [24] показана на рис. 4. Возникают две однородные цилиндрически расходящиеся детонационные волны — состояние a . Впоследствии они распространяются до поверхности симметрии OX , где происходит лобовое столкновение, — состояние b . Две волны продолжают распространяться, создавая регулярное отражение c , и дополнительно образуют маховское отражение d . Высокое давление, возникающее из-за взаимодействия двух волн, ускоряет ударный фронт вблизи плоскости симметрии, в результате чего две цилиндрически расходящиеся детонационные волны превращаются в почти плоскую детонационную волну.

Расчетная область выбрана в виде прямоугольника 8.0×5.0 см, на всех границах которого поставлены условия твердой стенки, используется сетка 20 ячеек/мм. Численные результаты показаны на рис. 5 для пяти характерных моментов времени, которые соответствуют инициированию, лобовому удару, регулярному отражению, отражению Маха и образованию плоской волны двух расходящихся волн. Видно, что нестационарный процесс согласуется с физическим механизмом. Изменение давления в точке лобового удара O иллю-

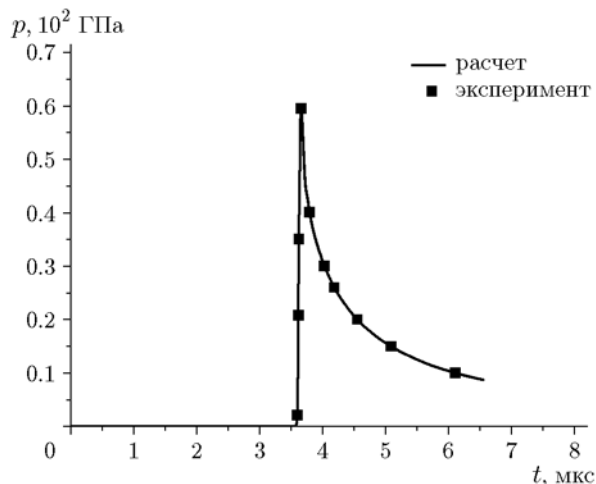


Рис. 6. История изменения давления в точке лобового удара

стрирует рис. 6, численные результаты отлично согласуются с экспериментом.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе построена термодинамически согласованная модель детонации ЗНД для описания тепловой неравновесности в твердых взрывчатых веществах. Особенностью предложенной модели является то, что закон сохранения внутренней энергии и эволюционное уравнение для объемной доли твердофазных реагентов, а также эволюционное уравнение для давления химической смеси решаются совместно с уравнениями Эйлера для химической смеси и уравнением сохранения массы для твердофазных реагентов, а давление химической смеси определяется непосредственно, а не вычисляется через консервативные переменные. Численные результаты демонстрируют адекватность предложенной термодинамически согласованной модели детонации ЗНД.

Работа поддержана Китайским фондом естественных наук (грант № 11772066), Проектом китайских научных исследований (грант № TZZT2016002), фондом Китайской академии инженерных наук (грант № CX2019026).

ЛИТЕРАТУРА

1. **Chapman D. L.** On the rate of explosion in gases // *Philos. Mag.* 213 Ser. 5. — 1899. — V. 47, N 284. — P. 90–104.
2. **Jouguet E. J.** Theory of detonation // *Pure Appl. Math. Ser. 6.* — 1904. — V. 70, N 1. — P. 347–388.

3. **Von Neumann J.** Theory of Detonation Waves: Collected Works. — New York: Macmillan, 1942. — V. 6.
4. **Zel'dovich Y. B., Kompaneets A. S.** Theory of Detonation. — New York: Academic, 1960.
5. **Fickett W., Davis W. C.** Detonation: Theory and Experiment. — Berkeley: Univ. of California Press, 1979.
6. **Lee J. H. S.** The Detonation Phenomenon. — Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2008.
7. **Nichols A. L., III.** Statistical hot spot model for explosive detonation // AIP Conf. Proc. — 2006. — V. 845. — P. 465–470.
8. **Kay J. J.** Mechanisms of shock-induced reactions in high explosives // AIP Conf. Proc. — 2015. — V. 1793. — P. 030023-1–030023-36. — DOI: 10.1063/1.4971481.
9. **Лобанов В. Ф.** Моделирование детонационных волн в гетерогенном конденсированном ВВ // Физика горения и взрыва. — 1980. — Т. 16, № 6. — С. 113–116.
10. **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.
11. **Lee E. L., Tarver C. M.** Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives // Phys. Fluids. — 1980. — V. 23, N 12. — P. 2362–2372.
12. **Conley P., Benson D., Howe P. M.** Microstructural effects in shock initiation // Proc. of the 11th Int. Detonation Symp., Snowmass, CO, United States, 1998. — P. 768–780.
13. **Baer M. R., Kipp M. E., van Swol F.** Micromechanical modeling of heterogeneous energetic materials // Proc. of the 11th Int. Detonation Symp., Snowmass, CO, United States, 1998. — P. 788–797.
14. **Тарасов М. Д., Карпенко И. И., Судовцов В. А., Толшмяков А. И.** Измерение яркостной температуры детонационного фронта в пористом взрывчатом веществе // Физика горения и взрыва. — 2007. — Т. 43, № 4. — С. 465–467.
15. **Petitpas F., Saurel R., Franquet E., Chinayya A.** Modelling detonation waves in condensed energetic materials: multiphase CJ conditions and multidimensional computations // Shock Waves. — 2009. — V. 19, N 5. — P. 377–401.
16. **Baudin G., Petitpas F., Saurel R.** Thermal non-equilibrium modelling of the detonation waves in highly heterogeneous condensed HE: a multiphase approach for metalized high explosives // Proc. of the 14th Int. Detonation Symp., Coeur d'Alene, Idaho, USA, 2010. — P. 230–240.
17. **Grove J. W.** Pressure-velocity equilibrium hydrodynamic models // Acta Math. Scientia. — 2010. — V. 30, N 2. — P. 563–594.
18. **Ndanou S., Favrie N., Gavriluk S.** Multi-solid and multi-fluid diffuse interface model: Applications to dynamic fracture and fragmentation // J. Comput. Phys. — 2015. — V. 295. — P. 523–555.
19. **Menikoff R.** JWL Equation of State // Tech. Rep. LA-UR-15-29536. — Los Alamos National Lab., USA, 2015.
20. **Tarver C. M., McGuire E. M.** Reactive flow modeling of the interaction of TATB detonation waves with inert materials // Proc. of the 12th Int. Detonation Symp., San Diego, California, USA, 2002. — P. 69–79.
21. **Strang G.** On the construction and comparison of difference schemes // SIAM J. Numer. Anal. — 1968. — V. 5, N 3. — P. 506–517.
22. **Zhong X.-L.** Additive semi-implicit Runge–Kutta schemes for computing high-speed nonequilibrium reactive flows // J. Comput. Phys. — 1996. — V. 128, N 1. — P. 19–31.
23. **LeVeque R. J.** Wave propagation algorithms for multidimensional hyperbolic systems // J. Comput. Phys. — 1997. — V. 131, N 2. — P. 327–353.
24. **Mader C. L.** Numerical Modeling of Explosives and Propellants. — 2nd ed. — New York: CRC Press, 1998.

Поступила в редакцию 16.08.2019.

После доработки 18.11.2019.

Принята к публикации 24.12.2019.