# ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА И МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

## УДК 536.2+534.222.2

А.В. Аттетков, Е.В. Пилявская

### ОЦЕНКА КРИТИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ УДАРНО-ВОЛНОВОГО ИНИЦИИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ В ДВУХФАЗНОМ ПОРИСТОМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ МАТЕРИАЛЕ

Исследован процесс диссипативного разогрева ударно-сжатого энергетического материала, содержащего сферические поры с термически тонким покрытием их поверхности. Полученные теоретические результаты использованы для определения порогового давления инициирования очаговой химической реакции в изучаемой системе.

#### E-mail: e.pilyavskaya@mail.ru

*Ключевые слова*: двухфазный пористый энергетический материал, ударно-волновое нагружение, критические условия инициирования химической реакции.

В исследованиях по ударно-волновому инициированию пористых энергетических материалов (ЭМ) важное место занимает вязкопластическая модель горячих точек — локализованных зон динамического перегрева ударно-сжатого ЭМ. Несмотря на достигнутые результаты по рассматриваемой проблеме (см., например, обзор [1] и цитируемую в нем литературу), ряд вопросов является еще открытым и требует дальнейшего изучения. В частности, актуальным остается вопрос о влиянии тонкого слоя пластификатора (в дальнейшем — термически тонкого покрытия) на процесс диссипативного разогрева и критические условия инициирования очаговой химической реакции в ударно-сжатом пористом ЭМ. Его изучение является основной целью проведенного исследования.

Рассмотрим задачу [1–7] о стационарной ударной волне (УВ), распространяющейся со скоростью D в двухфазном пористом ЭМ — несжимаемой вязкопластической среде (фаза 1), содержащей сферические поры радиуса a с покрытием (фаза 2; несжимаемая вязкая среда) их поверхности (регулярная ячеистая схема [8]; наличием газа в порах пренебрегается). При этом приняты следующие предположения:

1) характерная длина УВ много больше размера пор и расстояния между ними [2–7];

2) тепловой контакт на границе фаз 1 и 2 идеальный, покрытие является термически тонким и допустима реализация модели "сосредоточенная емкость" [9, 10];

3) объемным содержанием фазы 2 в единице объема пористого ЭМ можно пренебречь;

4) реализуется сильновязкий режим [1] затекания пор с сохранением их сферической формы.

При сделанных предположениях интегралы уравнений сохранения массы и импульса двухфазного пористого материала в системе координат, связанной с УВ, можно представить в виде [5]

$$p - p_0 = \rho_1 D^2 (\alpha_0 - \alpha) \alpha_0^{-2}, \tag{1}$$

справедливом для всех промежуточных состояний во фронте волны (индекс "0" характеризует параметры состояния перед фронтом УВ), где

$$p_0 = \frac{2Y}{3} \ln \frac{\alpha_0}{\delta + \alpha_0 - 1} \tag{2}$$

— амплитуда упругого предвестника; Y — предел текучести материала фазы 1. Давление p и плотность  $\rho$  двухфазного пористого ЭМ в (1), (2) связаны с фазовыми значениями величин выражениями [5–7]

$$p = \alpha^{-1} [\delta p_2 + (1 - \delta) p_1];$$
  

$$\rho = \alpha^{-1} [\delta \rho_2 + (1 - \delta) \rho_1] \approx \alpha^{-1} \rho_1;$$
  

$$\alpha = \frac{b^3}{b^3 - a^3}; \ \delta = \frac{c^3 - a^3}{b^3 - a^3},$$
(3)

где b — радиус сферического объема характерного (представительного) элемента двухфазного материала; c — радиус контактной границы фаз;  $\alpha$ ,  $\delta$  — концентрационные симплексы подобия изучаемого ЭМ.

Отметим, что реализация рассматриваемого (сильновязкого) режима затекания пор приводит к существованию волны с монотонным профилем (равновесное состояние позади фронта УВ в дальнейшем будет обозначено индексом e), при этом скорость  $\dot{\alpha}$  деформации двухфазного пористого ЭМ внутри фронта УВ определяется соотношением [5, 7]

$$\dot{\alpha}(\alpha) = -\frac{3\alpha(\alpha-1)(\delta+\alpha-1)}{4[\mu\alpha\delta+\eta(\alpha-1)(1-\delta)]}\rho_1 D^2 \times \\ \times \left[\frac{\alpha_0-\alpha}{\alpha_0^2} + \frac{2Y}{3\rho_1 D^2}\ln\frac{\alpha_0(\delta+\alpha-1)}{\alpha(\delta+\alpha_0-1)}\right], \quad (4)$$

где  $\eta, \mu$  — коэффициенты вязкости фаз 1 и 2 соответственно.

Процесс формирования температурного поля в ударно-сжатом пористом ЭМ определяется конкуренцией мезоскопических процессов тепловой диссипации (вследствие пластических деформаций материала фазы 1 и работы вязких сил фаз 1, 2) и теплопереноса. На стадии, предшествующей возбуждению очаговой химической реакции в рассматриваемой двухфазной системе с термически тонким покрытием поверхности затекаемых пор, математическая модель изучаемого процесса имеет вид [5, 6]

$$c_{1}\rho_{1}\left[\frac{\partial T(r,t)}{\partial t} + v_{r}\frac{\partial T(r,t)}{\partial r}\right] = \frac{\lambda_{1}}{r^{2}}\frac{\partial}{\partial r}\left[r^{2}\frac{\partial T(r,t)}{\partial r}\right] - \\ -2Y\frac{v_{r}}{r} + 12\eta\left(\frac{v_{r}}{r}\right)^{2}, \ c(t) < r < b(t), \ t > 0;$$

$$r(t)\big|_{t=0} = r_{0}; \ v(r,t)\big|_{t=0} = 0; \ T(r,t)\big|_{t=0} = T_{0};$$

$$\frac{\partial T(r,t)}{\partial r}\Big|_{r=b(t)} = 0;$$

$$\left. \sum_{r=c(t)} \frac{\delta}{3\lambda_{1}}\frac{\delta}{\delta + \alpha - 1} \times \right. \\ \left. \times \left[c_{2}\rho_{2}\frac{\partial T(r,t)}{\partial t}\Big|_{r=c(t)} - \frac{4\mu}{3}\frac{\dot{\alpha}^{2}}{(\alpha - 1)(\delta + \alpha - 1)}\right];$$

$$v_{r} = \frac{a_{0}^{3}\dot{\alpha}}{3(\alpha_{0} - 1)r^{2}}; \ r^{3} = r_{0}^{3} + a^{3}(t) - a_{0}^{3},$$

$$(5)$$

где T — температура;  $c_k, \lambda_k, k \in \{1, 2\}$ , — коэффициенты удельной теплоемкости и теплопроводности фаз 1 и 2 соответственно; скорость  $\dot{\alpha}$  деформации двухфазного пористого ЭМ во фронте УВ определяется равенством (4).

Математическая модель (4), (5) представляет собой смешанную задачу нестационарной теплопроводности, в которой наличие термически тонкого покрытия на поверхности пор фактически учтено граничным условием на подвижной границе фаз при r = c(t), явно содержащим производную от температуры по времени. По принятой терминологии [5, 6, 9, 10] данную математическую модель принято называть моделью "сосредоточенная емкость".

Для достижения основной цели исследования предположим, что процесс теплопереноса не оказывает существенного влияния на формируемое температурное поле в ударно-сжатом пористом ЭМ, формально полагая в (5)  $\lambda_1 = 0$ . Это позволяет представить скорость изменения температуры на подвижной границе фаз r = c(t) в виде

$$c_1 \rho_1 \frac{\partial T(r,t)}{\partial t} \bigg|_{r=c(t)} = \frac{4\mu}{3} \frac{c_1 \rho_1}{c_2 \rho_2} \frac{\dot{\alpha}^2}{(\alpha-1)(\delta+\alpha-1)},\tag{6}$$

а приращение удельной (на единицу объема) диссипированной энергии на границе фаз  $e^* = c_1 \rho_1 [T(c,t) - T_0]$  записать как

$$e^* = \frac{4\mu}{3} \frac{c_1 \rho_1}{c_2 \rho_2} \int_{\alpha_0}^{\alpha} \frac{\dot{\alpha}(\alpha') \, d\alpha'}{(\alpha' - 1)(\delta + \alpha' - 1)}.$$
(7)

В УВ с амплитудой  $p_e \gg Y$ , достаточной для практически полного затекатия пор ( $\alpha_e \rightarrow 1$ ), основной вклад в мезоскопический процесс тепловой диссипации анализируемого (сильновязкого) режима их затекания вносят вязкие свойства фаз изучаемого пористого ЭМ [7]. В пренебрежении объемным содержанием фазы 2 ( $\delta \approx 0$ ) это позволяет записать приращение удельной диссипированной энергии контактной границы фаз за фронтом УВ в виде

$$e_e^* = rac{3\mu}{4} rac{c_1 
ho_1}{c_2 
ho_2} rac{p_e^2}{\eta^2} au_\eta,$$

где  $\tau_{\eta} = 4\eta/p_e$  — характерное время затекания поры [1, 11–13]. Далее предполагая, что необходимым условием возбуждения очаговой химической реакции в ударно-сжатом двухфазном пористом ЭМ является условие достижения заданной температуры  $T_{ign}$  на контактной границе фаз, приращение удельной (на единицу объема) диссипированной энергии  $e_{ign}^* = c_1 \rho_1 (T_{ign} - T_0)$  при ударном переходе можно представить как

$$e_{ign}^* = \frac{3\zeta}{\varepsilon} p_{ign}^*,\tag{8}$$

где

$$\zeta = \frac{\mu}{\eta}, \ \varepsilon = \frac{c_2 \rho_2}{c_1 \rho_1}$$

— симлексы подобия вязких и физических свойств изучаемого материала соответственно. Здесь  $p_{ign}^*$  — предел возбуждения очаговой химической реакции в двухфазном пористом ЭМ при ударно-волновом нагружении, определяемый, согласно (8), выражением

$$p_{ign}^* = \frac{\varepsilon}{3\zeta} e_{ign}^*. \tag{9}$$

Для типичных ЭМ (таких, например, как тротил, ТЭН, гексоген), принимая  $c_1\rho_1 \simeq 2 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{K})$  и  $T_{ign} - T_0 = 400 \dots 600 \text{ K}$ , находим  $e_{ign}^* = 0.8 \dots 1.2 \text{ ГПа}$  [4]. Отметим, что оценка (9) предела ударноволнового инициирования очаговой химической реакции в двухфазном пористом ЭМ (нижнего предела зажигания по давлению [1]) отмечена верхним индексом \*, поскольку она может отличаться от фактического порогового давления  $p_{ign}$  возбуждения очаговой реакции в изучаемой системе вследствие проявления эффектов теплопроводности в процессе затекания пор (обычно  $p_{ign} > p_{ign}^*$ ). Для однофазного (при отсутствии покрытия на поверхности пор) пористого ЭМ подробное изучение данного вопроса проведено в работах [1, 4], для двухфазного — в работе [5].

Теоретическая оценка (9) физически правильно отражает существующие представления о процессе ударно-волнового инициирования очаговой реакции в пористых ЭМ при наличии тонкого слоя пластификатора на поверхности затекаемых пор. В частности, как следует из равенства (9), при  $\zeta < 1$  термически тонкое покрытие оказывает флегматизирующее действие на стадии генерации очагов разложения в ударно-сжатом пористом ЭМ [14, 15]. Отметим, что симплекс подобия  $\varepsilon$  физических свойств фаз ЭМ в этом случае близок к единице. Практический интерес представляет также случай  $\zeta > 1$ , при реализации которого термически тонкое покрытие оказывает сенсибилизирующее действие на процесс возбуждения очаговой химической реакции в пористом ЭМ при ударно-волновом нагружении. Его физическая интерпретация ассоциируется, например, с анализом проблемы ударноволновой чувствительности водоэмульсионных взрывчатых веществ, сенсибилизируемых полыми стеклянными микросферами [13, 16].

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта Президента РФ по государственной поддержке ведущих научных школ (грант НШ-255.2012.8).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Хасаинов Б. А., Аттетков А. В., Борисов А. А. Ударно-волновое инициирование пористых энергетических материалов и вязкопластическая модель горячих точек // Химическая физика. – 1996. – Т. 15, № 7. – С. 53–125.
- 2. Дунин С. З., Сурков В. В. Динамика закрытия пор во фронте ударной волны // Прикладная математика и механика. 1979. Т. 43, № 3. С. 511–518.
- 3. Дунин С. З., Сурков В. В. Эффекты диссипации энергии и влияние плавления на ударное сжатие пористых тел // Журнал прикладной механики и технической физики. 1982. № 1. С. 131–142.
- 4. А т т е т к о в А. В., С о л о в ь е в В. С. О возможности разложения гетерогенных ВВ во фронте слабой ударной волны // Физика горения и взрыва. – 1987. – Т. 23, № 4. – С. 113–125.
- 5. Attetkov A. V., Golovina E. V., Ermolaev B. S. Mathematical simulation of mesoscopic processes of heat dissipation and heat transfer in a two-phase porous material subjected to shock compression // Journal of Heat Transfer Research. 2008. Vol. 39, no. 6. P. 479–487.
- 6. А т т е т к о в А. В., Г о л о в и н а Е. В., Е р м о л а е в Б. С. Иерархия моделей процесса теплопереноса в двухфазном пористом материале при ударном сжатии // Труды V Всерос. национальной конф. по теплообмену. М., 2010. Т. 8. С. 50–53.
- 7. А т т е т к о в А. В., П и л я в с к а я Е. В. Эффекты тепловой диссипации при распространении ударной волны в двухфазном пористом материале // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2011. № 3. С. 53–58.
- 8. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред / В 2 ч. М.: Наука, 1987.
- 9. Пудовкин М. А., Волков И. К. Краевые задачи математической теории теплопроводности в приложении к расчетам температурных полей в нефтяных пластах при заводнении. Казань: Изд-во Казанского ун-та, 1978. 188 с.

- 10. А т т е т к о в А. В., В о л к о в И. К., П и л я в с к и й С. С. Иерархия математических моделей процесса теплопереноса в твердом теле со сферическим очагом разогрева, обладающим покрытием // Проблемы газодинамики и тепломассообмена в аэрокосмических технологиях: Труды XVII Школы-семинара молодых ученых и специалистов под руководством академика РАН А.И. Леонтьева. – М., 2009. – Т. 1. – С. 166–169.
- T w o p h a s e viscoplastic model of shock initiation of detonation in high density pressed explosives / B.A. Khasainov, A.A. Borisov et al. // VII Symp. (Int.) on Detonation. – Annapolis, 1981. – P. 435–448.
- M a i d e n D., N u t t G. A hot-spot model for calculating the threshold for shock initiation of pyrotechnic mixtures // XI International Pyrotechnics Seminar Vail. – Colorado, 1986. – P. 813–826.
- 13. Хасаинов Б. А., Ермолаев Б. С. Возбуждение химической реакции при ударно–волновом сжатии жидких ВВ, содержащих стеклянные микросферы // Химическая физика. 1992. Т. 11, № 11. С. 1588–1600.
- 14. Ингибирование разложения гексогена невзрывчатыми добавками при механических и ударно-волновых воздействиях / С.Г. Андреев, В.В. Зюзин и др. // Химическая физика. – 1998. – Т. 17, № 1. – С. 45-54.
- 15. Физика взрыва / Под ред. Л.П. Орленко. В 2 т. Т. 1. М.: Физматлит, 2002. 832 с.
- 15. K h a s a i n o v B. A., E r m o l a e v B. S., P l e s l e s H. N. Shock wave initiation of chemical reaction in liquid high explosives sensitized by glass microballoons // X Symp. (Int.) on Detonation. Boston, 1993. P. 40–43.

Статья поступила в редакцию 13.10.2011





Александр Владимирович Аттетков родился в 1955 г., окончил МВТУ им. Н.Э. Баумана в 1979 г. Канд. техн. наук, старший научный сотрудник, доцент кафедры "Прикладная математика" МГТУ им. Н.Э. Баумана. Лауреат премии Правительства РФ в области науки и техники. Автор более 100 научных работ в области физики горения и взрыва, химической физики и математического моделирования.

A.V. Attetkov (b.1955) graduated from Bauman Moscow Higher Technical School in 1979. Ph. D. (Eng.), senior researcher, assoc. professor of "Applied Mathematics" department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of more than 100 publications in the field of physics of combustion and explosion, chemical physics and mathematical simulation.

Елена Владимировна Пилявская окончила МГТУ им. Н.Э. Баумана в 2009 г. Аспирантка кафедры "Прикладная математика" МГТУ им. Н.Э. Баумана. Награждена медалью "'За лучшую научную студенческую работу"' по итогам открытого конкурса на лучшую научную работу студентов по естественным, техническим и гуманитарным наукам в вузах РФ. Автор 10 научных работ в области математического моделирования ударно-волновых процессов в многофазных средах.

Ye.V. Pilyavskaya graduated from Bauman Moscow State Technical University in 2009. Post-graduate of "Applied Mathematics" department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of 10 publications in the field of mathematical simulation of shock–wave processes in multiphase materials.