

**ПРЯМОЕ 3D ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА ГОРЯЧИХ ТОЧЕК В ДЕТОНАЦИИ****Ю. В. Янилкин, В. Г. Морозов, И. И. Карпенко, О. Н. Чернышова**

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Представлены результаты 3D численного моделирования процесса роста горячих точек в детонации с учетом турбулентного перемешивания. Проведенные исследования показали, что в результате воздействия УВ, развития неустойчивости на границе ВВ/ПВ и вихревого течения крупномасштабные частицы ВВ перемешиваются и дробятся до мелких размеров, при которых за счет развитой поверхности контакта ВВ и ПВ успевает происходить прогрев ВВ (передача энергии от ПВ) и эффективно продолжается реакция разложения. Численное моделирование позволило рассчитать скорость роста горячих точек (порядка 100–200 м/с). Это подтверждает гипотезу о том, что турбулентность в зоне реакции при механическом переносе вещества играет важную роль и ее необходимо учитывать в теории детонации.

*Ключевые слова:* горячий очаг, детонация, турбулентное перемешивание, численное моделирование.

**Введение**

Твердые ВВ гетерогенны. В них имеются поры и трещины, границы зерен и границы раздела фаз. Дефекты структуры (поры, межфазные и межгранулярные границы, кристаллические дефекты, трещины) влияют на ударно-волновую чувствительность и динамику перехода ударной волны (УВ) в детонацию. Инициирование ВВ происходит и тогда, когда энергии УВ не хватает для гомогенного нагрева ВВ до температуры вспышки. Локализация энергии УВ на неоднородностях структуры приводит к локальному разогреву и инициированию реакции разложения в так называемых горячих точках (ГТ).

Концепция горячих точек и очаговой механизм инициирования и развития детонации – базовые представления современной физики взрыва [1–7]. В рамках этой теории многие явления естественно объясняются тем, что взаимодействие УВ с дефектами структуры приводит к локализации диссипации энергии в отдельных очагах.

Условно картину инициирования гетерогенных ВВ можно разделить на три этапа.

**Первый этап** – формирование горячих точек. Это стадия от момента сжатия ВВ ударной волной до начала химической реакции в локальных очагах. Этот этап протекает примерно 1 нс и включает образование локализованных разогретых очагов в непосредственной близости к порам и границам зерен за счет эффектов разогрева газа в порах, микрокумулятивных эффектов при схлопывании пор, трения между гранулами и пластических деформаций [3–6].

**Второй этап** – рост горячего очага (либо его затухание) в зависимости от давления в окружающем сжатом «холодном» ВВ до соприкосновения с соседними очагами. На этом этапе происходит развитие реакции разложения в окружающем ВВ. Характерное время этого процесса много больше и определяет время индукции детонации ~1 мкс. Если средние размеры гранул ВВ ~ 10–100 мкм, то скорость границы горения очага с учетом времени индукции должна быть порядка 100 м/с. Скорость обычного послонного горения менее метра в секунду. В работах [8, 9] рассмотрена задача о росте ГТ в ВВ на основе ТАТБ в одномерном приближении и получена скорость роста ГТ менее 1 м/с.

Это указывает на необходимость более детального анализа физических процессов, определяющих скорость роста горячих очагов в ударно-сжатом ВВ.

**Третий этап** – взаимодействие и слияние очагов. На этом этапе происходит быстрое завершение реакции при высокой температуре и давлении в момент, когда реагирующие области начинают сливаться, что и обеспечивает быстрый переход к самоподдерживающемуся стационарному детонационному процессу (собственно взрыв).

Ключевым этапом для развития детонации является процесс роста горячих очагов, в результате которого происходит переход УВ в детонационную, и его зависимость от давления определяется процессом энергопереноса. Можно предположить, что в крупномасштабном горении ВВ зависимость скорости фронта горения от давления также определяется в первую очередь процессом энергопереноса. Существуют разные теории этого процесса, основная из них основана на молекулярной теплопроводности. Однако оценки скорости роста для ГТ дают величину не менее 100 м/с. Для получения такой скорости роста ГТ величина коэффициента теплопроводности для ПВ должна превосходить его значение в нормальных условиях на 3 порядка и более, что представляется физически не корректным.

В качестве такого механизма в настоящей работе рассматривается турбулентное перемешивание, идея возможности которого высказывалась ранее (см., например, [10–12]). Благодаря большой интенсивности турбулентного перемешивания турбулентные течения обладают повышенной способностью к передаче теплоты и ускоренному распространению химических реакций. Однако в этих работах турбулентность воспринималась как мелкомасштабный процесс, поэтому ее влиянием на процесс горения пренебрегалось. Более корректное исследование турбулентного механизма передачи энергии может быть проведено при помощи численного моделирования. Первое 2D численное исследование этого процесса было выполнено в работе авторов [13] с использованием  $k$ - $\epsilon$  модели.

Мы полагаем, что общая физическая картина процесса выглядит следующим образом. Турбулентность возникает из-за многомерности процесса горения и роста ГТ и вследствие газодинамической неустойчивости на фронте горения. Она перемешивает крупномасштабные частицы ВВ, при этом дробит их до таких мелких размеров, что в них за счет развитой поверхности контакта ВВ и ПВ успевают происходить прогрев (передача энергии

от ПВ к ВВ) и эффективно продолжается реакция разложения.

Настоящая работа является продолжением численных исследований работы [13]. В данной работе моделирование горения ВВ проводилось в 3D приближении по коду ЭГАК [14] без использования каких-либо моделей турбулентности, т. е. прямое численное моделирование (DNS). Для удобства читателей мы приводим также основные результаты работы [13], в которой 2D расчеты по коду ЭГАК проведены с использованием  $k$ - $\epsilon$  модели.

### Обозначения основных величин и их размерности

В работе, если не оговорено особо, применяются следующие размерности величин: время  $[t]$  = мкс; длина  $[L]$  = см; массовая скорость и скорость звука  $[u], [C_0]$  = км/с; плотность  $[\rho]$  = г/см<sup>3</sup>; калорийность  $[Q]$  = кДж/г; теплоемкость  $[C_V]$  = кДж/(г·К); коэффициент теплопроводности  $[\chi]$  = Дж/(м·с·К); температура  $[T]$  = К; давление  $[p]$  =  $10^{-4}$  ГПа; удельная энергия  $[e]$  = кДж/г; параметр кинетики Аррениуса  $[Z]$  = 1/с.

## 1. 2D моделирование

**Постановка расчетов.** Начальная геометрия для 2D осесимметричных расчетов показана на рис. 1.

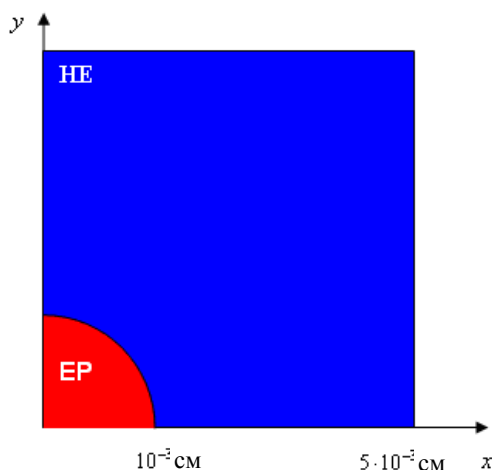


Рис. 1. Начальная геометрия 2D задачи

Рассматривается квадрат со стороной  $5 \cdot 10^{-3}$ . Четверть сферы радиусом  $R = 10^{-3}$  (красный цвет)

Таблица 1

Различные комбинации физических процессов, учтенных в 2D расчетах (+ означает наличие процесса, – означает отсутствие процесса)

Вариант	Газодинамика	Кинетика	Теплопроводность	Турбулентность
1	+	+	–	–
2	+	+	+	–
3	+	+	–	+
4	+	+	+	+

занимают нагретые ПВ в соответствии с калорийностью и теплоемкостью ВВ. В остальной области (синий цвет) находится холодное ВВ. Таким образом, здесь не моделируются процессы появления и нагрева ПВ.

Уравнение кинетики горения ВВ имеет следующий вид (закон Аррениуса):

$$\frac{dW}{dt} = -Z \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right)W.$$

Здесь  $W$  – массовая концентрация ВВ,  $T$  – температура ВВ, температура активации  $T_a = 30000$ ,  $Z = 5 \cdot 10^{13}$ .

Для ВВ использовалось уравнение состояния типа Ми–Грюнайзена

$$P = P_1 + P_2, \quad E = E_1 + E_2,$$

где 
$$P_1(\delta) = \frac{C_0^2 \rho_0}{n} (\delta^n - 1),$$

$$E(\delta) = \frac{C_0^2}{n} \left( \frac{\delta^{n-1}}{n-1} + \frac{1}{\delta} - 1 \right),$$

$$E_1(\delta) = \frac{1}{\rho_0} \int_1^\delta \frac{P_1(\tau)}{\tau^2} d\tau,$$

$$P_2 = \gamma \rho_0 \delta E_2.$$

Здесь  $\delta = \rho / \rho_0$  – относительное сжатие,  $\rho_0$  – плотность металла при нормальных условиях,  $\rho$  – текущая плотность металла,  $C_0$  – скорость звука в сплошном несжатом холодном веществе,  $n$  – подгоночный параметр.

В расчетах были использованы следующие параметры УРС:  $C_V = 0,00135$ ;  $C_0 = 2,43$ ;  $n = 6,2$ ;  $\gamma = 2,1$ ;  $\rho_0 = 1,93$ . Калорийность ВВ  $Q = 3,65$ .

Для ПВ использовалось уравнение состояния Зубарева [15] со следующими параметрами:  $C_V = 0,001018$ ;  $A = 2,21547$ ;  $F = 75,8018$ ;  $n = 0,6$ ;  $\xi = 4,38302$ ;  $\gamma_0 = 0,5$ .

Кроме газодинамики и кинетики горения ВВ в расчетах в различных сочетаниях включались теплопроводность и турбулентность по  $k$ - $\epsilon$  модели. Вариация физических процессов в расчетах приводится в табл. 1. Основные 2D расчеты проводились на равномерной эйлеровой сетке  $100 \times 100$ .

Отметим, что в коде ЭГАК уравнение теплопроводности решается относительно средней энергии в ячейке [16]. После того как найдены новые средние энергии, в смешанных ячейках энергия распределяется между веществами исходя из определенных предположений. В данных расчетах использовалось предположение о мгновенном выравнивании температур компонентов. Данное предположение, не совсем корректное для смешанных ячеек, содержащих контактные границы между двумя сильно различными веществами, для перемешанных вследствие турбулентности веществ представляется вполне корректным. Это фактически означает, что в таких ячейках теплообмен между веществами осуществляется мгновенно, что соответствует предположению о гомогенном характере перемешивания вещества в ячейке.

**Результаты расчетов.** На рис. 2 показаны графики зависимости массы ПВ от времени для расчетов 1–4 с учетом теплопроводности и турбулентности в различных сочетаниях. Получен следующий основной результат: включение вместе турбулентности и теплопроводности обеспечивает физически разумную скорость роста горячего очага и передает в расчете характерные физические особенности процесса. В то же время учет каждого из процессов по отдельности (теплопроводности или турбулентности) не обеспечивает необходимой скорости роста горячего очага.

На рис. 3 приведен график зависимости радиуса ПВ от времени в расчете 4 с учетом всех процессов. Видно, что кривая достаточно быстро выходит на приблизительно линейный закон роста, на котором средняя скорость роста ГТ составляет:  $\frac{\Delta R}{\Delta t} \approx 200$  м/с.

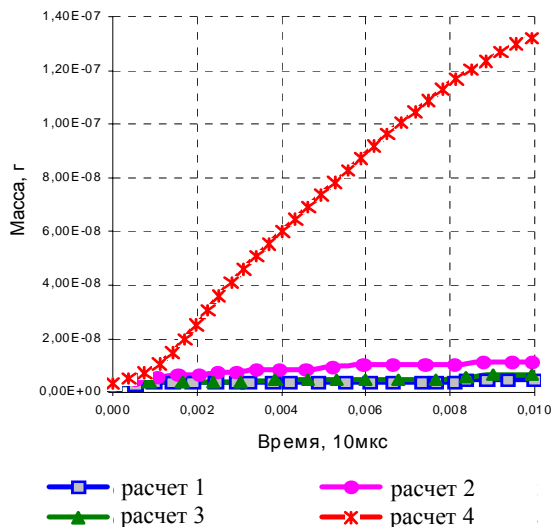


Рис. 2. Зависимости массы ПВ от времени в 2D расчетах

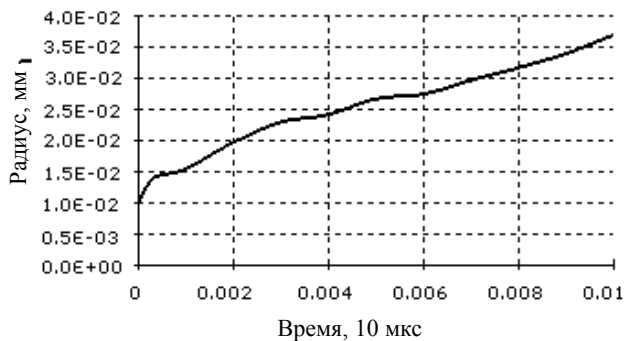


Рис. 3. Зависимость радиуса ПВ от времени в 2D расчете 4

## 2. 3D моделирование

3D расчеты проводились на неподвижных счетных сетках в эйлеровых переменных с разделением ВВ и ПВ на разные вещества с использованием метода концентраций для моделирования движения контактных границ [17], являющегося составной частью кода ЭГАК. В 3D расчетах модели турбулентности не использовались, с точки зрения турбулентности такие расчеты представляли собой прямое численное моделирование. Все 3D расчеты проводились с учетом процесса теплопроводности. Отметим, что в этих расчетах, как и выше в 2D расчетах, используется предположение о равенстве температур компонентов в смешанных ячейках, что соответствует предположению о гомогенном характере перемешивания веществ в ячейке.

В 3D расчетах, в отличие от 2D расчетов в предыдущем разделе, учитывалась конфигурация структуры ВВ с наличием газовых включений. Реальные конфигурации могут иметь различные формы (см., например, рис. 7,а), сложные для воспроизведения в расчетах. Поэтому задача была упрощена, а именно были выбраны две простейшие формы: в виде сферы и тетраэдра.

### 2.1 Моделирование формирования горячего очага вокруг разогретого газового включения

В этой серии расчетов моделировалось формирование горячего очага из ПВ после прохождения УВ через ВВ и сферическое газовое включение. Процесс прохождения УВ через ВВ в этой серии не моделируется, в начальный момент времени предполагается, что газовое включение уже разогрето УВ.

**Постановка расчетов.** Начальная геометрия представляет собой куб со стороной  $5 \cdot 10^{-3}$ . Восьмую часть сферы радиусом  $R = 10^{-3}$  занимает газ с начальными данными  $\rho_0 = 0,4$ ,  $p_0 = 0,32$ ,  $e_0 = 4$ . УРС – «идеальный газ» со следующими параметрами:  $\gamma = 1,2$ ,  $C_V = 0,0004$ . Таким образом, температура газа в начальный момент  $T = e/C_V = 10000$ . В остальной области находится ВВ с начальными данными  $\rho_1 = 1,91$ ,  $p_1 = 8$ ,  $e_1 = 2,02349$ . Уравнения состояния газа, ВВ и ПВ, а также параметры кинетики Аррениуса те же, что и в основных расчетах раздела 1.

Использовались следующие коэффициенты теплопроводности:  $\chi_{\text{газ}} = 150$ ;  $\chi_{\text{ВВ}} = 0,5016$ ;  $\chi_{\text{ПВ}} = 1$ , однако в одном из расчетов эти коэффициенты для всех веществ были увеличены в 10 раз.

Основные расчеты проводились на равномерной сетке  $100 \times 100 \times 100$ . Кроме того, был проведен один расчет на сетке  $400 \times 400 \times 400$ . В табл. 2 представлены варианты расчетов первой серии с вариацией количества ячеек, коэффициентов теплопроводности и параметра кинетики  $Z$ . На внешних границах куба задавалось граничное условие «жесткая стенка».

На границе между газом и ВВ для развития турбулентности задаются «затравочные» начальные возмущения: берется кубик со стороной в две ячейки и случайным образом в него заносится либо газ, либо ВВ. Начальная форма газа после задания возмущений показана на рис. 4. Отметим, что в расчете на более подробной сетке амплитуды начальных возмущений мельче в соответствии с размерами ячеек.

Т а б л и ц а 2

Варианты расчетов первой серии 3D расчетов

Номер расчета	Размер ячейки	Z	Форма газа	Коэффициенты теплопроводности
1	0,5	$5 \cdot 10^{13}$	Сфера	$\chi_{газ} = 150$ ; $\chi_{ВВ} = 0,5016$ ; $\chi_{ПВ} = 1$
2	0,5	$5 \cdot 10^{14}$	Сфера	$\chi_{газ} = 150$ ; $\chi_{ВВ} = 0,5016$ ; $\chi_{ПВ} = 1$
3	0,5	$5 \cdot 10^{13}$	Сфера	$\chi_{газ} = 1500$ ; $\chi_{ВВ} = 5,016$ ; $\chi_{ПВ} = 10$
4	0,125	$5 \cdot 10^{13}$	Сфера	$\chi_{газ} = 150$ ; $\chi_{ВВ} = 0,5016$ ; $\chi_{ПВ} = 1$
5	0,125	$5 \cdot 10^{13}$	Тетраэдр	$\chi_{газ} = 150$ ; $\chi_{ВВ} = 0,5016$ ; $\chi_{ПВ} = 1$

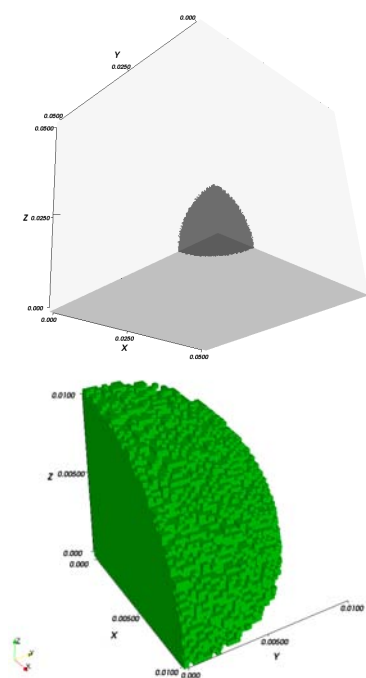


Рис. 4. Начальная геометрия 3D задачи

Параметры 3D расчетов были взяты в соответствии с аналитическими расчетами из [18, 19]. Вариация параметров теплопроводности в расчетах связана с отсутствием достоверных данных по коэффициентам теплопроводности для веществ, особенно ВВ, подвергнутых ударному сжатию. Что касается кинетики Аррениуса и ее параметров, то в данных расчетах она использовалась как некий индикатор или пороговый «включатель» реакции разложения при определенном нагреве ВВ, и ее параметры подбирались так, чтобы при заданных УРС реализовался критический режим роста единичного очага на фоне нереагирующего ВВ. Было проверено в расчете, что увеличение на поряд-

док значения предэкспоненты Z в кинетике Аррениуса приводит к гомогенной химической реакции в объеме, что соответствует физической логике.

Как уже отмечено выше, реальная форма газовых включений, которые образуются на стыке нескольких зерен ВВ, сложна и не является сферической [20] (рис. 5,а), поэтому был проведен расчет 5 (см. табл. 2) с формой газового включения в виде тетраэдра. При этом газовое включение располагается внутри кубической счетной области для уменьшения влияния внешних жестких стенок на развитие процесса, что потребовало увеличения размеров куба до  $6 \cdot 10^{-3}$ . В остальном постановка расчетов совпадает с постановкой расчета 4 для подробной сетки ( $h = 1,25 \cdot 10^{-5}$ ), кроме УРС для ПВ, которое в этом расчете задавалось в форме идеального газа с  $\gamma = 3$ . На рис. 7,б, в показана начальная геометрия газа.

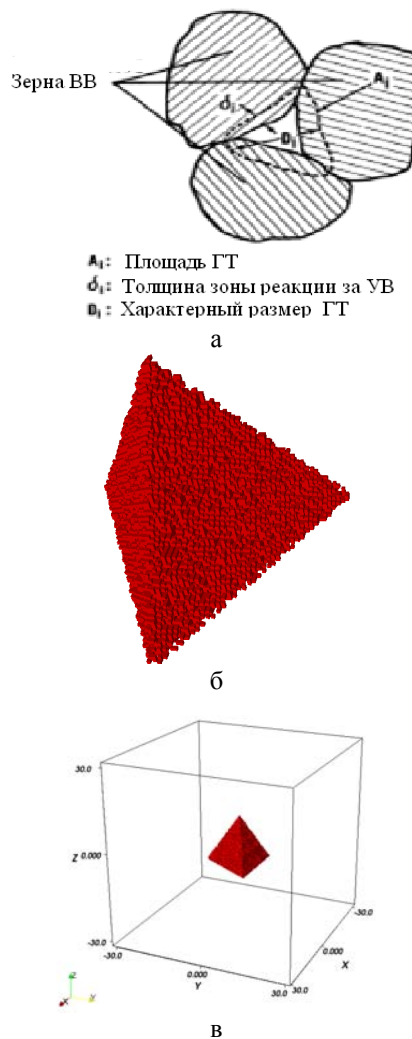


Рис. 5. Форма газовых включений и начальная геометрия для единичного горячего очага

**Результаты расчетов.** На рис. 6, 7 и 8 приводятся поля концентраций ПВ на три момента времени из расчетов 1, 4 и 2 соответственно.

На рис. 9 представлены объемные концентрации ПВ (в диапазоне от 0,001 до 1) для расчета 5. Очаг ПВ формируется там, где первоначально находился газ, и со временем увеличивается.

На рис. 10 представлены графики зависимости массы ПВ от времени в расчетах 1–5. Видно, что в расчете 2, в котором параметр кинетики  $Z$  был

увеличен в 10 раз, масса ПВ существенно больше, чем в других расчетах. Этот вариант досчитан только до времени 0,42 мкс, поскольку к этому моменту ВВ выгорело почти во всей области, и дальнейший счет уже не представляет интереса. Здесь происходит гомогенная химическая реакция в объеме ВВ и ускорение роста очага на фоне гомогенной реакции. Это логично, так как время индукции гомогенных реакций очень мало.

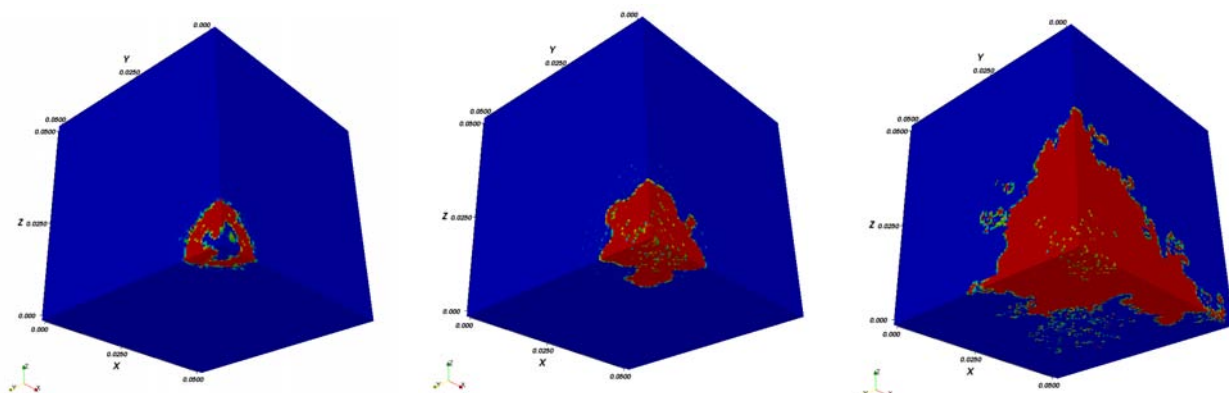


Рис. 6. Расчет 1. Концентрации ПВ (от 0 до 1) на  $t = 10^{-8}, 10^{-7}, 10^{-6}$  (слева направо)

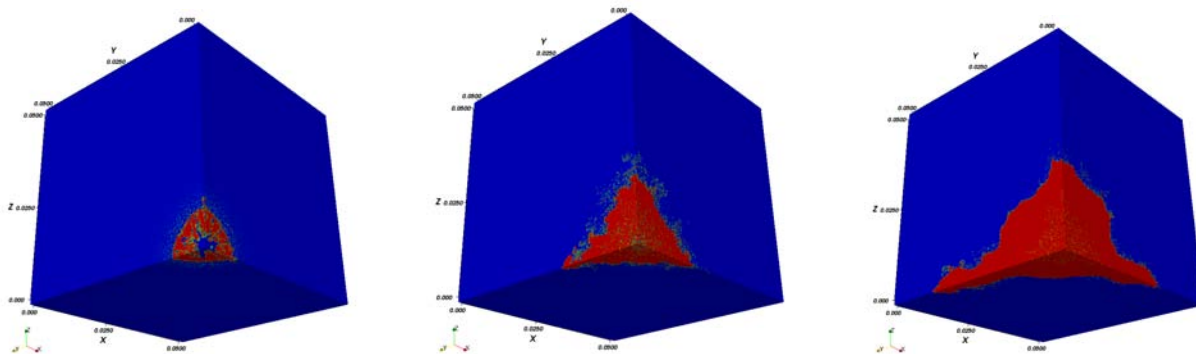


Рис. 7. Расчет 4. Концентрации ПВ (от 0 до 1) на  $t = 10^{-8}, 10^{-7}, 10^{-6}$  (слева направо)

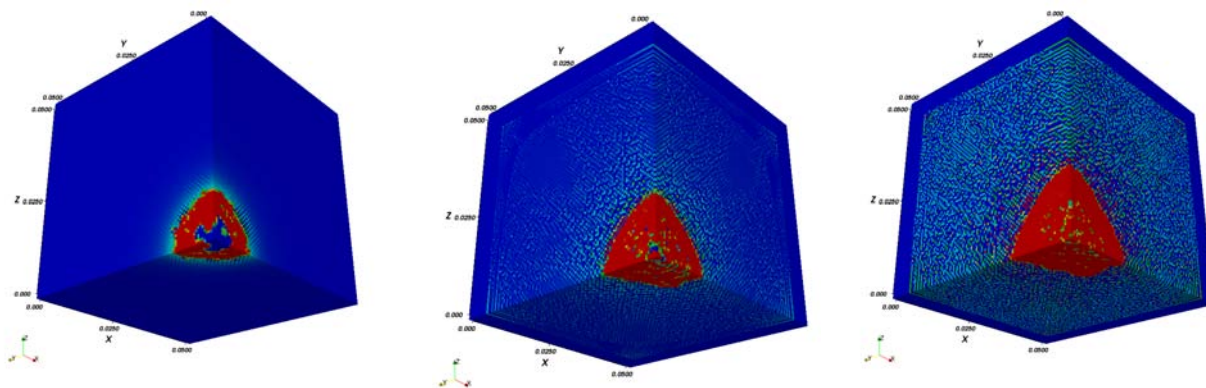


Рис. 8. Расчет 2. Концентрации ПВ (от 0 до 1) на  $t = 10^{-8}, 5 \cdot 10^{-8}, 10^{-7}$  (слева направо)

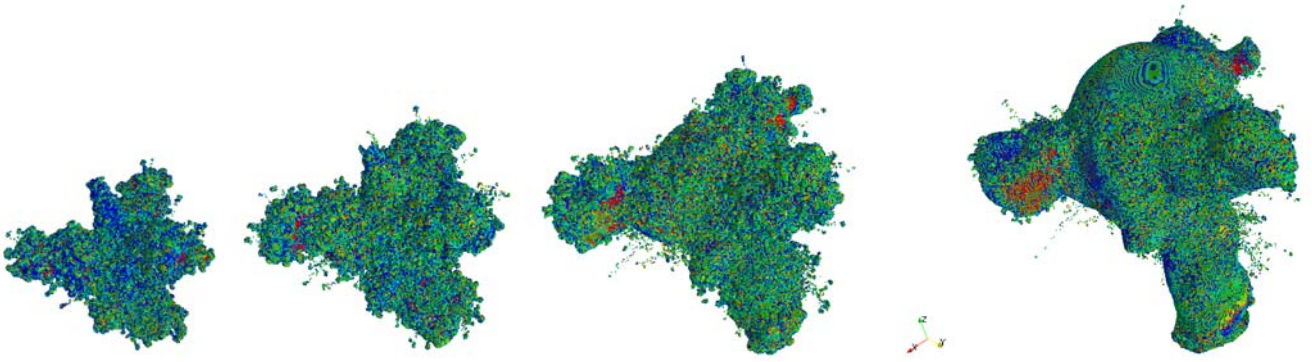


Рис. 9. Расчет 5. Концентрации ПВ (от 0 до 1) на  $t = 5 \cdot 10^{-8}, 10^{-7}, 2 \cdot 10^{-7}, 4 \cdot 10^{-7}$  (слева направо)

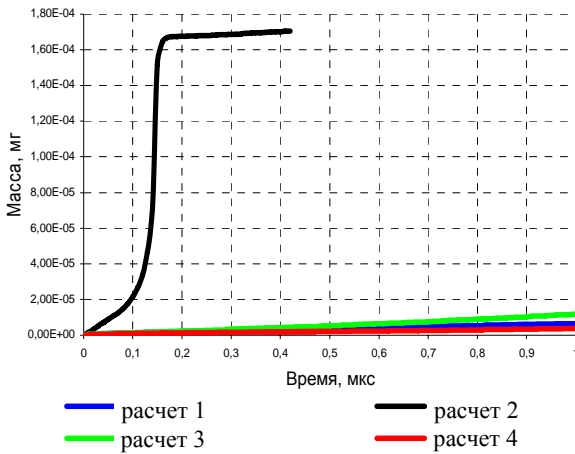


Рис. 10. Графики зависимости массы ПВ от времени в расчетах 1–4

Если сравнить между собой массы ПВ в остальных расчетах, то можно отметить, что при увеличении коэффициентов теплопроводности (расчет 3) масса ПВ увеличивается. В расчете 4 на подробной сетке масса ПВ несколько меньше, чем в расчете 1. Этому факту способствуют два обстоятельства. Во-первых, начальные возмущения на подробной сетке меньше по амплитуде, что приводит к замедленному развитию турбулентности на начальной стадии процесса, во-вторых, в этих расчетах сильно влияние внешних жестких стенок, по рисункам видно, что вдоль них происходит более интенсивное развитие процесса, которое опять-таки уменьшается с уменьшением размеров ячеек. Более сильное развитие возмущений вдоль стенок происходит вследствие двух обстоятельств, во-первых, практически в любой разностной схеме может иметь место так называемый осевой эффект, вследствие особого счета граничных ячеек, во-вторых, в данном случае наличие стенки уменьшает степень свободы для развития

турбулентных вихрей, что также способствует развитию возмущений вдоль стенок.

#### Определение скорости роста горячего очага.

Для определения скорости роста очага использовались два метода. Первый – визуально по рисункам. В этом случае скорость роста очага составила  $\sim 70$  м/с в расчетах 1 и 5, т. е. независимо от постановки она фактически одна и та же.

Второй критерий основан на подсчете массы выгоревшего ВВ (масса образовавшихся ПВ), приведенной к сферическому очагу. В условиях развитой неустойчивости такой критерий является оценкой снизу для скорости роста очага. Радиус сферы за вычетом начальной области газа определяется по формуле

$$R = \sqrt[3]{\frac{3V}{4\pi} + R_0^3}, \quad (1)$$

где  $V$  – объем ПВ, а  $R_0$  – начальный радиус газового включения (для тетраэдра – это радиус его объема, приведенного к сфере). На рис. 11 приводится график зависимости радиуса пятна ПВ от времени в расчете 5, полученный по второму критерию. В этом расчете скорость роста составила  $\sim 20$  м/с.

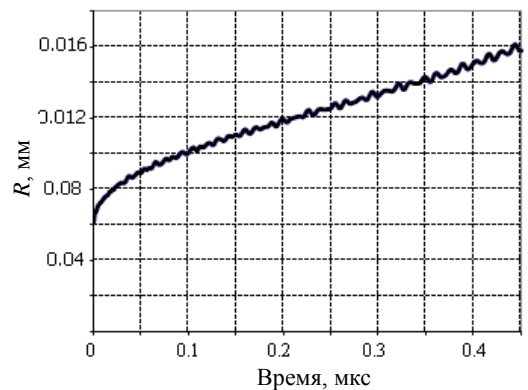


Рис. 11. График зависимости радиуса пятна ПВ от времени в 3D расчете 5

Таким образом, и при прямом моделировании задачи получаем подтверждение гипотезы о важной роли турбулентности в рассматриваемой задаче, в расчетах имеет место увеличение скорости роста отдельного горячего очага. Однако все же в этой серии расчетов необходимая скорость роста не достигается. Поэтому была проведена более реалистичная серия расчетов, описываемая в следующем разделе.

### 2.2. Моделирование формирования горячего очага вокруг газового включения за фронтом волны

**Постановка расчетов.** В данной серии из трех расчетов (расчеты 6–8) моделировалась более реальная задача, а именно рост очага при прохождении ударной волны. Геометрия представляет собой прямоугольный параллелепипед  $60 \times 60 \times 180$  мкм, в котором находятся два газовых включения в форме тетраэдров (рис. 12), начальные размеры которых совпадают с размерами из раздела 2.1. На левой границе по  $x$  задается втекающий поток, соответствующий падающей УВ, на правой границе задано условие вытекания, остальные границы – жесткие стенки. В расчетах варьировались начальные данные для газа и ВВ и параметры УВ.

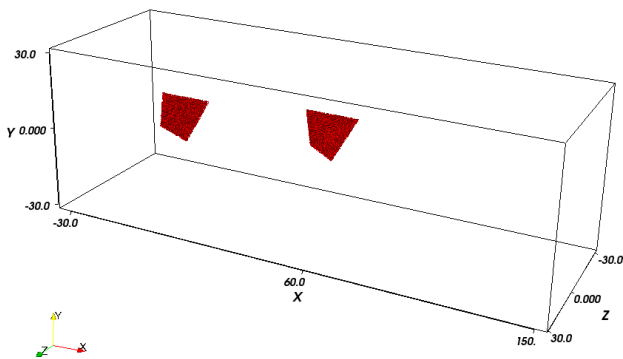


Рис. 12. Начальная геометрия 3D расчета с двумя газовыми включениями

**Расчет 6.** Параметры УРС для газа и ПВ такие же, что и для расчета 5 раздела 2.1, отличаются лишь параметры ВВ:  $C_V = 0,001$ ;  $C_0 = 2,9$ ;  $n = 5,4$ ;  $\Gamma = 1,25$ ;  $\rho_{00} = 1,91$ .

На втекающей границе задается поток с параметрами:  $\rho = 2,37$ ;  $p = 8$ ;  $e = 0,745$ ;  $u = 0,86$ .

**Расчет 7.** Данный расчет отличается от расчета 6 лишь начальными данными: для газа  $\rho = 0,4$ ;

$p = 10^{-4}$ ;  $e = 0,00125$ ;  $T = 3,125$ ; для ВВ  $\rho = 1,91$ ;  $p = 10^{-4}$ ;  $e = 0,00004$ ;  $T = 0,04188$ ; а также втекающим потоком  $\rho = 2,485$ ;  $p = 10$ ;  $e = 0,61$ ;  $u = 1,1$ .

**Расчет 8.** В этом расчете были заданы следующие начальные данные: для газа  $\rho = 0,001$ ;  $p = 0$ ;  $e = 0,3$ ;  $T = 300$ ; для ВВ  $\rho = 1,91$ ;  $p = 0$ ;  $e = 0,3$ ;  $T = 300$ ; втекающий поток  $\rho = 2,485$ ;  $p = 10$ ;  $e = 0,92$ ;  $u = 1,1$ .

Для того чтобы в начальный момент энергии и температуры были выровнены, к давлению для газа и ВВ, получаемым по УРС, добавлялась величина  $\delta p = (\gamma - 1)\rho e$ , где  $e = C_V T$  выбрана таким образом, чтобы температура на  $t = 0$  равнялась 300.

**Результаты расчетов.** На рис. 13 показаны объемные концентрации ПВ в одном из расчетов на несколько моментов времени (время отсчитывается от момента прихода УВ на первый очаг). Когда УВ достигает газовых включений, на их месте формируются очаги ПВ, которые движутся, растут и затем сливаются.

На рис. 14 приведены  $R-t$  диаграммы размеров горячих очагов в этих расчетах, сосчитанных по формуле (1) без газового включения. Для всех трех расчетов происходит выход на примерно линейный участок роста радиуса от времени, то есть на постоянное значение скорости роста. В табл. 3 приведены скорости роста каждого пятна в расчетах, определенные на линейных участках. Видим, что скорости роста пятен во всех расчетах больше 100 м/с, при этом скорости роста второго пятна значительно больше по сравнению со скоростью первого пятна. Это следствие того, что на первое пятно действует идеализированная (невозмущенная) УВ, а на второе пятно – УВ, возмущенная при прохождении первого пятна. Это является дополнительным фактором, способствующим большей турбулизации течения.

Таблица 3

Скорости роста пятен на линейном участке (м/с)

Расчет	6	7	8
1-е пятно	112	122	200
2-е пятно	150	154	242



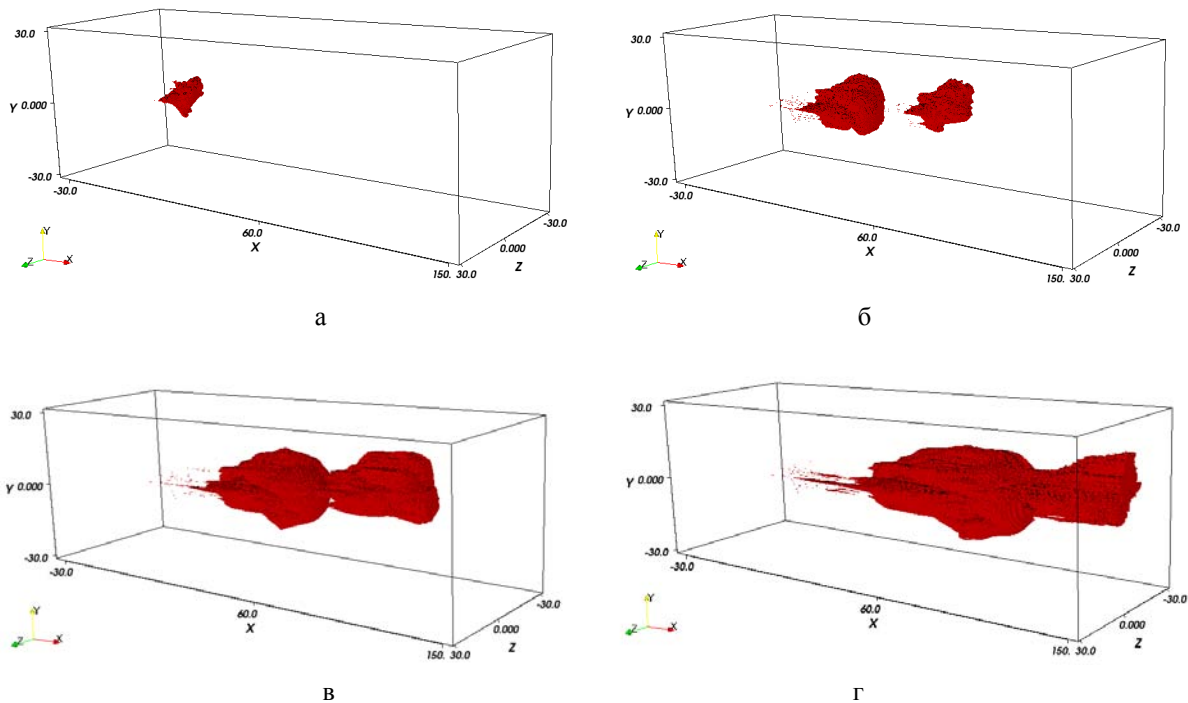


Рис. 13. Объемные концентрации ПВ в 3D расчете 8: а –  $t = 1 \cdot 10^{-8}$ ; б –  $3 \cdot 10^{-8}$ ; в –  $5 \cdot 10^{-8}$ ; г –  $7 \cdot 10^{-8}$

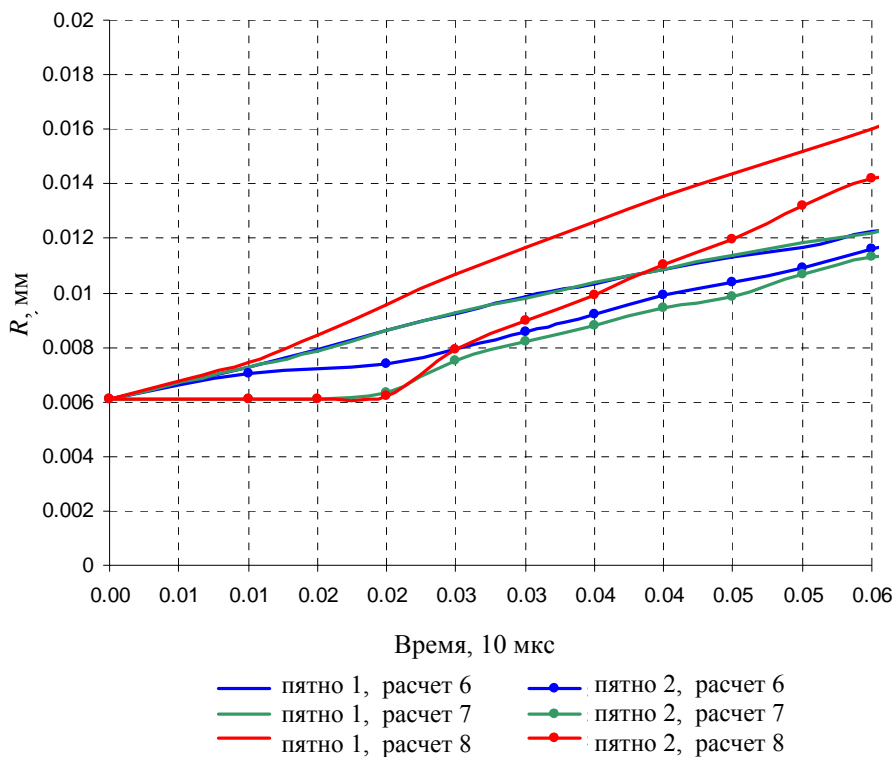


Рис. 14. Графики зависимости радиусов пятен ПВ от времени в 3D расчетах 6–8

### Обсуждение результатов

При численном моделировании процесса горения ГТ с учетом турбулентного перемешивания

(как 3D DNS, так и 2D  $k-\epsilon$ ) и теплопроводности получаются значительно большие скорости горения ГТ по сравнению с ламинарным послойным горением. Эффект увеличения скорости имеет ме-

сто при разных постановках задачи. При наиболее реальных постановках задачи скорость роста ГТ составляет ~100–200 м/с, что достаточно для детонационного режима роста ГТ. Таким образом, проведенное численное исследование подтверждает гипотезу о том, что турбулентность в зоне реакции является важным фактором при горении ГТ и ее необходимо учитывать как в численных расчетах, так и в теории детонации.

Физическая картина горения ГТ представляется следующей: УВ при сжатии нагревает газы до высокой температуры, при нагреве стенок начинается газофазная реакция разложения и развивается неустойчивость на границе ВВ/ПВ. Основной процесс энергопереноса в пространстве происходит турбулентно, в результате вихревого течения крупномасштабные частицы ВВ перемешиваются и дробятся до мелких размеров. Вследствие этого за счет развитой поверхности контактной границы между ВВ и ПВ успевает происходить прогрев ВВ (передача энергии от ПВ) и эффективно продолжается реакция разложения.

Таким образом, последовательно обосновывается турбулентная природа переноса энергии и роль теплопроводности для прогрева холодного ВВ при развитой поверхности контакта ВВ и ПВ при дроблении гранул. Экспериментальные исследования зоны реакции с высоким разрешением [21, 22] подтверждают сложную ячеистую структуру фронта детонации, период возмущения которого коррелирует с размером гранул ВВ.

### Заключение

Проведенное численное моделирование носит качественный исследовательский характер и не претендует на безусловную точность при оценке количественных показателей развития процесса. Тем не менее, моделирование с учетом турбулентного перемешивания и теплопроводности позволило получить скорости роста ГТ, достаточные для детонационного режима роста ГТ. Тем самым получено подтверждение гипотезы о том, что турбулентность в зоне реакции ВВ является важным фактором при горении ГТ и ее необходимо учитывать в численных расчетах и теории детонации.

Авторы благодарят Глазырина С.И. за полезные обсуждения и критические замечания, а также Чиркину И.А. за помощь при оформлении статьи.

### Список литературы

1. Андреев К. К., Харитон Ю. Б. Некоторые соображения о механизме самораспространяющихся реакций // Доклады АН СССР. 1934. Т. 1. С. 402–404.
2. Беляев А. Ф. Возникновение детонации взрывчатых веществ под действием теплового импульса // Доклады АН СССР. 1938. Т. 18. С. 267–270.
3. Харитон Ю. Б., Сухих В. А. Возникновение всплеска во взрывчатом веществе при кратковременных деформациях. 1947 г. // Харитон Ю. Б. Сборник научных трудов. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2003.
4. Bowden F. P., Stone M. A., Tudor G. K. // Proc. R. Soc. 1947. Vol. A. 188. P. 329.
5. Eyring H., Powel R. E., Duffrey G. H., Darlin R. B. // Chem. Rev. 1949. Vol. 45. P. 69.
6. Bowden F. P., Yoffe A. D. Initiation and Growth of Explosions in Liquids Solids. Cambridge, UK: Cambridge University Press., 1952.
7. Campbel A. W., Davis W. S., Ramsay J. B., Travis J. R. // Phys. Fluids. 1961. Vol. 4, N 4. P. 511.
8. Tarver C.M., Nichols A.L. III. Hot Spot Growth in a Thermal-Chemical-Reactive Flow Model for Shock Initiation of Solid Explosives // Proceedings of XIth Symposium on Detonation. P. 599–605.
9. Mazel P., Saurel R., Baudin G., Loraud J. C. Study of Pyrolysis and Gas Reaction Influence on the Explosive Ignition Mechanism by Viscoplastic Pore Collapse // HDP 1995 Congress, Tours, France.
10. Трофимов В. С., Дремин А. Н. К обоснованию правила отбора для скорости детонации // ФГВ. 1966, № 3. С. 19–30.
11. Рыбакин С. С. Турбулентность при детонации // ФГВ. 1966, № 1. С. 29–36.
12. Морозов В. Г., Карпенко И. И. Турбулентный механизм переноса энергии при росте горячих точек в процессе детонации // Междунар. конф. «Ударные волны в конденсированных средах»: С. Петербург, 1–6 сентября 2002 г.
13. Карпенко И. И., Морозов В. Г., Чернышова О. Н., Янилкин Ю. В. Расчет скорости роста горячих очагов в процессе детонации с учетом турбулентного механизма передачи энергии // Химическая физика. 2008. Т. 27, № 3. С. 16–20.
14. Янилкин Ю. В., Беляев С. П., Бондаренко Ю.А. и др. Эйлеровы численные методики ЭГАК и ТРЭК для моделирования многомерных течений многокомпонентной среды // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. Научно-исследовательское издание. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2008. Вып. 12. С. 54–65.

15. Жерноклетов М. В., Зубарев В. Н., Телегин Г. С. Изэнтропы расширения продуктов взрыва конденсированных ВВ // Журнал прикладной механики и технической физики. 1969. Вып. 4. С. 127–132.

16. Бахрах С. М., Глаголева Ю. П., Самигулин М. С., Фролов В. Д., Яненко Н. Н., Янилкин Ю. В. Расчет газодинамических течений на основе метода концентраций // ДАН СССР. 1981. Т. 257, N 3. С. 566–569.

17. Бондаренко Ю. А., Шагалиева А. Р., Янилкин Ю. В. Метод расчета теплопроводности с учетом теплообмена между веществами внутри смешанных ячеек // Математическое моделирование. 2002. Т. 14, № 7. С. 15–26.

18. Морозов В. Г., Карпенко И. И., Куратов С. Е., Соколов С. С., Шамраев Б. Н., Дмитриева Л. В. Теоретическое обоснование феноменологической модели ударноволновой чувствительности ВВ на основе ТАТБ // Химическая Физика. 1995. Т. 14, № 2–3. С. 32.

19. Морозов В. Г., Карпенко И. И., Ольхов О. В., Соколов С. С., Шамраев Б. Н., Дмитриева Л. В., Плаксин И. Е., Евстигнеев А. А., Ковтун А. Д., Герасименко В. Ф., Шуйкин А. Н., Комрачков В. А., Макаров Ю. М., Герасимов В. М., Шутов В. И. Расчетное моделирование с опорой на эксперименты инициирования и развития детонации ВВ на основе ТАТБ с учетом десенсибилизации при взаимодействии ударной и детонационной волн: Препринт № 37. Арзамас-16: РФЯЦ ВНИИЭФ, 1995.

20. Pier K. Tang. Initiation and Detonation of Heterogeneous High Explosive. A Unified Model. LASL Report, La-11352-MS, 1988.

21. Plaksin I., Campos J. etc. Micro-Ejecta from Detonation Front as an Ignored Negative Factor in Performance of Detonation. Proceeding of 36 International Conference of ICT-Energetic Materials. Germany, 2005.

22. Plaksin I., Campos J. etc. Coarse Explosive Particles of PBX as a Dominant Factor of Detonation Instability. SCCM-2003. Portland, USA. P. 887.

Статья поступила в редакцию 02.07.2015