На правах рукописи

-11P32

Прууэл Эдуард Рейнович

Скоростная рентгеновская томография и уравнение состояния продуктов детонации конденсированных взрывчатых веществ

1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Автореферат диссертации на соискание учёной степени доктора физико-математических наук

Новосибирск - 2022

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии начк

Долгобородов Александр Юрьевич Официальные доктор физико-математических наук, зав. лабораториоппоненты: ей ударно-волновых воздействий, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, г. Москва. Лебедев Александр Иванович доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ" Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, г. Саров. Киселев Сергей Петрович доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск. Федеральное государственное унитарное предприятие Ведущая «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всеросорганизация: сийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина», г. Снежинск.

Защита диссертации состоится « 30 » ноября 2022 г. в « 15:00 » часов на на заседании Диссертационного совета 24.1.150.01 при ФГБУН Институте химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (ИХКГ СО РАН) по адресу: 630090, Новосибирск, ул. Институтская, д. 3, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИХКГ СО РАН и на сайте http://kinetics.nsc.ru. Текст автореферата размещён на сайте Высшей аттестационной комиссии при Министерстве образования и науки Российской Федерации по адресу: http://vak.minobrnauki.gov.ru.

Автореферат разослан 07 сентября 2022 г.

Учёный секретарь диссертационного совета кандидат химических наук

Лодриена И.П. Поздняков

Общая характеристика работы

Работа посвящена комплексному экспериментальному и теоретическому исследованию параметров детонации конденсированных взрывчатых материалов – структуре детонационного течения и уравнению состояния продуктов взрыва.

В рамках работы была проведена глубокая реконструкция экспериментальной станции для проведения исследований методом скоростной рентгенографии с использованием синхротронного излучения (СИ) на базе ускорителя электронов ВЭПП-3 Института ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН г. Новосибирск. Возможности новой станции являются рекордными. Станция оборудована взрывной камерой на 50 г взрывчатого вещества, позволяющей получать рентгенографические изображения исследуемого детонационного течения непосредственно в процессе взрыва.

Для исследований течений с цилиндрической симметрией разработана оригинальная методика, позволяющая определять распределение плотности и ряд газодинамических параметров течения при детонации зарядов конденсированных взрывчатых веществ. По полученным данным восстанавливается адиабата разгрузки продуктов взрыва исследуемого взрывчатого состава, которая является характеристикой исследуемого взрывчатого вещества и может использоваться для моделирования и предсказания характеристик течения в других условиях. Методика позволила уточнить адиабаты разгрузки известных взрывчатых веществ, для ряда новых составов впервые получены уравнения состояния продуктов взрыва.

Используя методы статистической физики, построена модель термодинамики реагирующей смеси плотных газов для условий взрыва конденсированных энергетических материалов. В основе подхода лежит численное моделирование методами классической молекулярной динамики небольшого NVT ансамбля молекул, взаимодействующих с простым парным потенциалом exp-6. Полная внутренняя энергия системы вычислялась прямым суммированием потенциальной энергии пар взаимодействующих молекул и табличными значениями внутренней энергии молекул. Для определения равновесного химического состава использовался метод реагирующих частиц (Reactive Monte Carlo), основанный на итеративном поиске и усреднении исследуемых параметров моделируемой системы. Разработан алгоритм, позволяющий определять параметры ударных волн и детонации Чепмена-Жуге для широкого круга горючих смесей. Проведено тестирование модели путем сравнения с экспериментальными данными.

Актуальность работы

Несмотря на опасность обращения, конденсированные энергетические материалы являются безальтернативной основой компактных мощных импульсных источников энергии. Широкое использование в технологии и научном эксперименте сформулировало ряд "вечных" проблем использования энергии взрыва: для добывающей промышленности это вопросы экономической эффективности и безопасности обращения; для устройств специального назначения это вопросы стабильности существующих составов и разработка новых, более эффективных. Для решения этих задач необходимо согласованное развитие экспериментальных методик, позволяющих получать прецизионные данные о поведении вещества в условиях взрыва, и численных моделей с глубокой научной основой, прокалиброванных на известных экспериментальных данных и обладающих предсказательной силой.

В диссертационной работе реализована идеологически относительно простая методика абсорбционной рентгенографии детонационного течения. Но высокое пространственное и временное разрешение методики позволяет получать уникальные данные о структуре детонационного течения. Эти данные являются основой для построения эмпирических уравнений состояния и калибровки моделей с глубоким теоретическим обоснованием.

Реализованный и прокалиброванный программный комплекс позволяет определять термодинамические и газодинамические параметры течений в экстремальных условиях, в частности для задач взрыва. Выбранный в работе подход относительно малопараметрического уравнения состояния несколько проигрывает в точности при описании конкретного вещества, но выигрывает в универсальности, позволяя удовлетворительно описывать смеси из большого спектра химических компонент в широком диапазоне давлений и температур.

Степень разработанности темы исследования

Благодаря высокому пространственному и временному разрешению, методики синхротронной диагностики находят широкое применение для исследования быстропротекающих и детонационных процессов. За последнее десятилетие специализированные станции появились в США, Франции, Германии и Англии. Исследовательский потенциал синхротронного излучения для научных и технологических задач только раскрывается. Методами рентгенографии, в основном, исследуются относительно тонкие объекты, а получаемые характеристики представляются в относительных единицах ослабления излучения. Станция с возможностью получать метрологические значения плотности при детонации толстых зарядов остается актуальной научной задачей.

Расчетные модели уравнения состояния плотных реагирующих газов активно развиваются. Появляются программные комплексы с глубокой теоретической основой, в этой области наблюдается постепенный эволюционный прогресс. Построение модели уравнения состояния, работающей для широкого диапазона сжатий и согласованной с экспериментальными данными – это актуальная научная задача.

4

Цели и задачи работы

Целью работы являлась разработка согласованных экспериментальной и расчетной методик определения газодинамических параметров детонационного течения.

Для этого ставились следующие промежуточные задачи:

- Разработать экспериментальную методику скоростной рентгеновской томографии с высоким пространственным и временным разрешением с возможностью получать количественные значения интеграла массы на луче.
- Разработать методики обработки экспериментальных данных и восстановления газодинамических параметров течения при детонации цилиндрических зарядов конденсированных взрывчатых веществ. Критическим требованием к методике является устойчивость к ошибке экспериментальных данных.
- Разработать и протестировать расширяемую модель уравнения состояния плотных реагирующих газов для условий детонации и ударноволнового нагружения.

Новизна работы

Некоторые результаты работы является новыми и даже рекордными.

- Модернизирована экспериментальная станция для исследования детонационных процессов с помощью синхротронного излучения на ускорителе ВЭППЗ ИЯФ СО РАН. Станция позволят проводить рентгенографические исследования с рекордными возможностями: массами зарядов до 50 г, широким полем наблюдения 40 мм и временем между рентгеновскими кадрами 124 нс.
- Реализована оригинальная методика, позволяющая определять распределение газодинамических параметров цилиндрическисимметричного течения: плотности $\rho(r, z, t)$, давления p(r, z, t), вектора массовой скорости $\vec{v}(r, z, t)$ и адиабаты разгрузки продуктов детонации в виде политропного уравнения состояния $p(\rho)$. Получены параметры Чепмена-Жуге и адиабаты разгрузки продуктов детонации чистых и смесевых взрывчатых составов на основе тэна, гексогена, тротила, ТАТБ (триаминотринитробензол), БТФ (бензотрифуроксана), ГАВ (гексанитрогексаазаизовюрцитан, ГНИВ, CL-20), эмульсионного взрывчатого вещества на основе аммиачной селитры и композиций энергетических материалов с добавками алюминия.

• Сами по себе основные положения реализованной модели уравнения состояния плотных газов не новы и были предложены другими авторами. Их эффективность для задач взрыва была показана в работах предшественников. Новизна реализованного подхода заключается в подборе одного базиса параметров, подходящего для широкого набора термодинамических условий и исследуемых смесей. Впервые проведено сравнение с широким массивом данных: данные Американского института стандартов при сжатии до 1 ГПа, сжатие в алмазных наковальнях до давлений 100 ГПа, ударные адиабаты сжиженных газов, зависимости параметров детонации конденсированных взрывчатых веществ от начальной плотности, адиабаты разгрузки продуктов детонации.

Теоретическая и практическая значимость

Созданная экспериментальная методика скоростной рентгенографии позволяет получать количественные характеристики параметров детонационного течения. Она позволяет контролировать стабильность параметров известных взрывчатых веществ и исследовать новые составы. Полученные экспериментальные данные используются для контроля безопасности и боеспособности составов, применяемых в специальных устройствах Российских ядерных центров (г. Саров и г. Снежинск).

Была проведена серия исследований по оптимизации составов для синтеза детонационного углерода и увеличения метательной и фугасной способности составов для АО "ГосНИИмаш" г. Дзержинск.

Разработанное и протестированное уравнение состояния плотных реагирующих газов позволяет предсказывать детонационные свойства новых составов без проведения экспериментов по известной энтальпии образования и начальной плотности. Разработанный программный комплекс позволяет проводить удаленные вычисления по сети Интернет (http://ancient.hydro.nsc.ru/chem).

Программный комплекс успешно используется для проведения научных расчетов, оптимизации горючих смесей в технологических процессах и для анализа задач взрыво- и пожаробезопасности. Он был использован при анализе взрывобезопасности взвесей сульфидных руд в атмосфере воздуха, образующейся при добыче полиметаллических руд в шахтах. Были выработаны рекомендации для предприятий г. Норильска.

Методология и методы исследования

Для экспериментального определения параметров детонационного течения использовались методы скоростной рентгеновской радиографии. Для построения уравнения состояния использовались методы классической молекулярной динамики.

Положения, выносимые на защиту

По результатам работы сформулированы следующие положения, выносимые на защиту.

- 1. Методика скоростной рентгеновской томографии цилиндрическисимметричных газодинамических течений, возникающих при детонации зарядов конденсированных взрывчатых веществ. Методика использует дополнительную информацию о структуре течения исследуемого процесса и позволяет значительно повысить точность восстановления пространственного распределения плотности.
- 2. Методика восстановления параметрического баротропного $(p = \Pi(\rho))$ уравнения состояния продуктов детонации конденсированных взрывчатых веществ по данным скоростной рентгенографии. Методика основывается на подборе уравнения состояния, при котором за фронтом детонационной волны реализуется течение с рентгеновской тенью, хорошо соответствующей эксперименту.
- 3. Модель уравнения состояния плотных газов с учетом равновесного химического состава. Модель основывается на классическом молекулярно-динамическом моделировании небольшого ансамбля взаимодействующих молекул и прямом определении давления и полной энергии системы. При этом равновесный состав подбирается методом реагирующего ансамбля Монте-Карло (Reactive Monte Carlo). Модель позволяет определять термодинамические параметры плотных газов в условиях взрыва в диапазоне температур от нормальных условий до 5 000 К и давлений до 50 ГПа.

Достоверность и апробация результатов

Достоверность экспериментальных результатов по определению газодинамических параметров детонационного течения подтверждается сравнением с экспериментальными и расчетными данными других работ. Достоверность разработанной модели уравнения состояния плотных реагирующих газов подтверждается сравнением с экспериментальными данными в широком диапазоне давлений, температур. При этом использовались разнообразные экспериментальные данные по сжатию веществ в алмазных наковальнях, ударным адиабатам сжиженных газов и параметрам детонации газообразных и конденсированных взрывчатых смесей.

Результаты работы представлены на ряде авторитетных Российских и международных конференций в области физики взрыва, уравнений состояния и экспериментальных методик с использованием синхротронного излучения.

• Забабахинские научные чтения г. Снежинск (2021, 2019, 2017, 2014, 2012, 2010, 2007, 2005, 2003 г.г.).

- Международная конференция Харитоновские тематические научные чтения «Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны» (2017, 2015, 2013, 2011, 2009, 2007, 2005, 2003, 2001 г.г.)
- Лаврентьевские чтения по математике, механике и физике г. Новосибирск (2020, 2015, 2010 г.г.).
- International Detonation Symposium (2018, 2014, 2010 г.г.).
- Synchrotron and Free electron laser Radiation: generation and application (2020, 2014, 2012, 2008, 2004 г.г.)
- 9 Международный семинар по структуре пламени (2017).

Всего по материалам диссертационной работы подготовлено 41 публикация. Из них 14 статей с определяющим вкладом автора опубликовано в журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией при Министерстве образования и науки Российской Федерации и в ведущих международных журналах.

Соответствие специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Диссертационная работа соответствует п. 1 "экспериментальные методы исследования химической структуры и динамики химических превращений", п. 3 "Молекулярная динамика, межмолекулярные потенциалы и молекулярная организация веществ" и п. 7 "Закономерности и механизмы распространения, структура, параметры и устойчивость волн горения, детонации, взрывных и ударных волн", паспорта научной специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества (отрасль науки — физико-математические).

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, 3-х глав, заключения, библиографии и приложения. Общий объем диссертации 207 страниц. Библиография включает 173 ссылки.

Благодарности

С большим удовольствием выражаю благодарность людям, без которых эта работа бы не существовала. Зубкову Павлу Ивановичу, за приглашение в команду по развитию методик исследования быстропротекающих процессов с использованием синхротронного излучения. Тену Константину Алексеевичу, исследователю, тонко чувствующему важные моменты постановки взрывного эксперимента. Толочко Борису Петровичу, моему учителю, открывшему мир синхротронного излучения.



Рисупок 1 – Схема проведения репттепографического эксперимента и Фотографии бункера СИ ВЭШІ-3.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулированы цели и представлена научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе описываются экспериментальные станции, использующие пучковые методы диагностики быстропротекающих процессов: технические характеристики, развиваемые методики и объекты исследований. Подробно описаны возможности станции на ускорительном комплексе ВЭППЗ ИЯФ СО РАН. Приведено описание методики проведения рентгенографического эксперимента по исследованию детонационного течения.

С точки зрения потребителя, синхротрон является современной альтернативой рептгеновской трубке. Большая интенсивность излучения позволяет проводить рептгенографические и дифракционные исследования, значительно сокращая время измерений, а качество пучка – реализовать новые методики, педоступные для рептгеновской трубки.

Схема проведения взрывного эксперимента представлена па рисунке 1. Излучение от ускорителя через систему коллимации, по вакуумированному каналу, для уменьшения ослабления пучка, поступает через прочные рентгенопрозрачные окна в герметичную взрывную камеру. Прошедшее через заряд и ослабленное, излучение регистрируется скоростным детектором. В такой постановке можно определить динамику рентгеновской тени и характеристики плотности исследуемого течения.

Для генерации излучения используется пучок электронов с энергией 2 ГэВ. В простом вигглере с одним рабочим промежутком с индукцией магнитного поля 2 Тл генерируется излучение с эффективной энергией фотонов 15-25 кэВ. Это хорошо подходит для исследования относительно тонких зарядов взрывчатого вещества диаметром до 2 см.

На расстоянии около 18 метров от источника на исследуемом об-

разце формируется горизонтальная полоса излучения шириной 40 мм и высотой от 0.1 до 1 мм. Большая горизонтальная протяженность является рекордной для исследования взрывных процессов на источниках СИ и позволяет исследовать широкий круг масштабных явлений.

Прошедшее излучение регистрируется одномерным газовым детектором. Детектор регистрирует 100 временных кадров, с промежутком 124 нс и с экспозицией одного кадра 124 нс. Каждый кадр состоит из 512 пространственных каналов с шагом 0.1 мм. Специализированный детектор был разработан сотрудниками ИЯФ СО РАН [1–5].

Параметры станции в области исследования объектов с малой рентгеновской плотностью являются уникальными. После последней реконструкции в станции задействованы все возможности ускорителя и источника излучения. В некоторой степени достигнуты предельные возможности имеющегося ускорителя.

Анализ мировых центров по исследованию быстропротекающих процессов показал, что это направление интенсивно развивается. Рентгеновские методики, разработанные для статических объектов, переносятся на динамические объекты. Реализованы методы абсорбционной и фазовой радиографии, малоуглового рассеяния и дифракции, идет поиск новых методик. Расширяется спектр исследуемых явлений: энергетические материалы, ударные волны в инертных материалах, генерируемые пневматическими пушками и импульсным лазерным излучением.

Сложно создать станцию, подходящую для широкого спектра методик и объектов исследований. Рекордные параметры достигаются на специализированных станциях. Надо понимать свой научную нишу.

Характеристики ускорительного комплекса ВЭПП-3, источника излучения и оборудования исследовательской станции наилучшим образом подходят для проведения скоростного рентгеновского исследования детонационных течений. Ряд достигнутых параметров и научных результатов является абсолютным мировым рекордом.

Для исследования детонационного течения использовались две постановки рентгенографического эксперимента. В первой, продольной, исследуемый заряд зондировался вдоль оси (2, а). В этой постановке определялась динамика рентгеновской тени вдоль оси заряда. Простая в анализе, эта постановка позволяет определять и контролировать постоянство скорости детонационной волны. Для нестационарных течений, метод позволяет исследовать динамику развития волнового процесса.

Во второй, поперечной, постановке определялась динамика рентгеновской тени в поперечном сечении (рис. 2, б). В качестве результатов проведения эксперимента получался набор интенсивностей теней в разные моменты времени в фиксированном сечении исследуемого заряда. Эти данные служили основой для постановки задачи томографии структуры внутреннего течения.

Для восстановления массы на луче ($\int \rho dl$) проводилась калибровка



Рисунок 2 – Схема ориентации исследуемого заряда и детектора: а – продольные измерения для определения скорости детонационной волны или структуры нестационарного течения; б – поперечные измерения для определения внутренней структуры течения.

детектора. Для этого снимались тени от набора однородных пластин из материала заряда разной толщины. Для каждого канала строилась калибровочная зависимость интенсивности детектора от толщины просвеченного материала (ρd). При обработке динамического эксперимента эта зависимость обращалась – из значений интенсивности детектора определялось количество массы на пучке.

После описанной процедуры, с учетом небольшого геометрического коэффициента увеличения изображения на детекторе (1.044), восстанавливались пространственные распределения средней плотности вещества для разных моментов времени.

Специальные исследования, проведенные командой, разрабатывающей детектор, показали, что пространственное разрешение составляет 1–2 канала или 0.1-0.2 мм. Общая точность измерения массы на луче составляет от 0.1 г/см² при маленьких плотностях до 0.5 г/см² при предельных просвечиваемых толщинах 5 г/см².

Для определения динамики средней плотности вдоль оси заряда и скорости детонационной волны проводились продольные рентгенографические эксперименты. Схема проведения экспериментов показана на рисунке 2 а, результаты исследования детонационного течения зарядов представлены на рисунках 3 и 4.

Для проведения исследования в поперечной постановке использовалась схема эксперимента, представленная на рисунке 2 б, результаты исследования детонационного течения заряда на основе октогена приведены на рисунке 5.



Рисупок 3 – Динамика распределения рептгеновской тени вдоль оси заряда из смеси октогена с алюминием: а – интенсивность ослабленного излучения, б – масса на луче (ρd , Γ/cm^2).



Рисунок 4 – Распределения массы на луче с шагом 0.248 мкс для заряда ТАТБ диаметром 20 мм.



Рисунок 5 — Рентгеновская тень (
 $\rho d,$ г/см²) при детонации заряда ТИТ50% | гексоген
50%.

Во второй главе приводится описание 3х методик обработки данных рентгенографического эксперимента: восстановление плотности, газодинамических параметров детонационного течения по подобранному давлению и уравнению состояния продуктов взрыва. Для широкого круга взрывчатых составов определены значения параметров детонации Чепмена-Жуге.

Современные методы томографии позволяют с большой точностью определять внутреннее распределение плотности даже в сложных объектах. Для этого производится многократное просвечивание одного сечения с разных ракурсов. После соответствующей математической обработки большого количества теней, восстанавливается распределение плотности $\rho(x, y)$ в одном сечении. За редким исключением, многоракурсная томография динамического течения – непозволительная роскошь. Требуются методики анализа внутренней структуры объекта при просвечивании с одного ракурса.

Для простых объектов с цилиндрической симметрией достаточно одного ракурса для восстановления зависимости плотности от радиуса. Для этого необходимо решить интегральное уравнение Абеля относительного неизвестного распределения плотности $\rho(r)$ по известной тени F(x):

$$F(x) = \int_{x}^{R_0} \frac{2r}{\sqrt{r^2 - x^2}} \rho(r) dr.$$
 (1)

В качестве простого алгоритма восстановления плотности, дающего удовлетворительную точность, в работе было использовано соотношение из [6]

$$\rho(r) = -\frac{1}{\pi r} \frac{d}{dr} \int_{r}^{R_0} \frac{xF(x)}{\sqrt{x^2 - r^2}} dx.$$
 (2)

При вычислении интеграла в правой части соотношения 2, F(x) задавалась в виде кубического сглаживающего сплайна [7], проведенного через экспериментальные точки. Параметр степени сглаживания подбирался из условий разумного соотношения точности и пространственного разрешения.

Результаты восстановления распределения плотности в детонационном течении представлены на рисунке 6. На распределении плотности хорошо видно исходную структуру заряда перед взрывом, различим искривленный фронт детонационной волны и разлет продуктов взрыва. К сожалению, точность восстановления значений плотности и пространственное разрешение метода низки. Разрывы в плотности на границе заряда и на фронте детонационной волны смазываются. При расширении продуктов взрыва за границы наблюдаемой области, алгоритм перестает работать. Для восстановления распределения плотности необходимо иметь зависимость тени от пространственной координаты для всего объекта, с захватом свободного края.



Рисунок 6 Зависимость плотности от радиуса и времени при инициировании заряда пористого тэна потоком горячих газов в сечении 6 мм от инициируемого торца.



Рисунок 7 – Структура сетки и узлов для корректного описания распределения плотности.

Анализируя опыт метода восстановления плотности по инверсии Абеля, были сформулированы основные положения для совершенствования методики: экспериментальных данных много, исследуемое течение не очень сложное, можно использовать стлаживание, в том числе между разными моментами времени; необходимо учесть все разрывы в плотности, это края заряда и разрыв на искривленной поверхности фронта.

В основе метода восстановления распределения плотности по нескольким временным сечениям лежит пространственно-временная анпроксимация зависимости плотности от радиуса и от времени в исследуемом сечении. Для этого в координатах (r,t) строилась сетка опорных узлов плотности (рис. 7). Для определения плотности необходимо задать ее геометрию: искривление фронта $(t = \alpha r^2)$, положение по радиусу опорных узлов и фиксированный угол разлета продуктов детонации β , а также значение плотности во всех опорных узлах. Обычно для описания плотности требуется задать около 30 вещественных параметров.

По лучам, направленным вдоль оси времени, через опорные узлы строились кубические сплайны, позволяющие восполнить плотность в любой точке на луче. Для восстановления распределения плотности в



Рисунок 8 – Структура течения при детонации цилиндрического заряда эмульсионного взрывчатого вещества на основе аммиачной селитры.

требуемый момент времени (пунктирная прямая на рисупке 7), в точках пересечения с временными сплайнами определялись значения плотности. По полученным значениям строился сплайн от радиуса вдоль пунктирной линии. Таким образом, в исследуемом сечении восполнялось параметрическое распределение плотности для любой точки на радиусе r и момента времени t, покрываемого опорной сеткой.

По полученному распределению плотности можно восстановить тень F'(r,t) и сравнить ее с измеренной в эксперименте. В упрощенной формулировке метод восстановления плотности заключается в подборе параметров плотности, хорошо соответствующей измеренной в эксперименте тени.

В строгой математической постаповке алгорит
м формулирустся следующим образом. Строится функция Error суммы квадратов отклопений экспериментальной и тестируемой теней по всем экспериментальным точкам по раднусу и по времени, зависящая от значений плотности в узлах
 ρ_i и параметров сетки –

$$(\alpha, \beta, \rho_1, \rho_2, \dots \rho_n) \Rightarrow \rho'(r, t) \Rightarrow F'(r, t),$$

$$Error(\alpha, \beta, \rho_1, \rho_2, \dots \rho_n) = \sum_{i,j} \left(F(r_i, t_j) - F'(r_i, t_j) \right)^2$$

У сложной нелинейной функции $Error(\alpha, \beta, \rho_1, \rho_2, ..., \rho_n)$ численно ищется минимум. Набор вещественных параметров, соответствующий минимуму невязки, и соответствующее ему распределение плотности $\rho(r, t)$ называется решением. На рисунке 8 представлено восстановленное распределение плотности.

Несмотря на технические сложности, связанные с многопараметрической анпроксимацией плотности, метод устойчиво работает. По сравнению с инверсией Абеля, он значительно устойчивсе к опшбке. Кроме того, он позволяет явно выделить особенности плотности вблизи искривленного фронта, в частности, удается выделить короткую зону химической реакции (рис. 8).

Для работы описанного метода необходим эффективный алгоритм поиска экстремума функции от нескольких десятков переменных. Наибольшую эффективность продемонстрировал симплекс метод поиска экстремума функции многих переменных.

В работе описана методика восстановления газодинамических параметров течения путем подбора пространственного распределения давления. Пусть в исследуемом стационарном течении известно пространственное распределение давления p(r, z). Тогда, зная граничные условия на фронте детонации, можно, решив задачу газовой динамики, восстановить пространственное распределения плотности и массовой скорости. Иными словами, как будет показано, по известному распределению давления однозначно восстанавливаются плотность и вектор массовой скорости в рассматриваемом потоке.

Для обоснования этого метода рассмотрим систему стационарных уравнений газовой динамики течения с цилиндрической симметрией при известном распределении давления – p(r, z):

Запишем систему уравнений газовой динамики для плоского стационарного течения. Задача – восстановить компоненты массовой скорости – u(r, z) и v(r, z) и плотность $\rho(r, z)$ при известной функции p(r, z).

$$\frac{\partial r\rho u}{\partial r} + \frac{\partial r\rho v}{\partial z} = 0,$$
$$\frac{\partial r\rho u^2}{\partial r} + \frac{\partial r\rho uv}{\partial z} + r\frac{\partial p}{\partial r} = 0,$$
$$\frac{\partial r\rho v^2}{\partial z} + \frac{\partial r\rho uv}{\partial r} + r\frac{\partial p}{\partial z} = 0.$$

Представленная система была проанализирована. Найдены уравнения характеристик:

$$(vdr - udz)^3 = 0.$$

Получены соотношения на характеристиках:

$$\begin{split} du/dl &= -p_r/(\rho\sqrt{u^2+v^2}),\\ dv/dl &= -p_z/(\rho\sqrt{u^2+v^2}),\\ d(r\rho)/dl &= -r\rho(u_r+v_z)/(u^2+v^2)^{1/2}. \end{split}$$

Проанализированная система является гиперболической относительно координаты вдоль линии тока. Полученные соотношения вдоль характеристик позволяют реализовать явный метод определения плотности и двух компонент массовой скорости, двигаясь от фронта по всей



Рисунок 9 – Параметры течения при детонации заряда ТАТБ: а –
давление, б-плотности, в- вектор массовой скорости.

области, занятой потоком. Данный подход был реализован и показал свою состоятельность.

При обработке реальных экспериментальных данных по динамике рентгеновской тени от детонационного течения в качестве основы использовалось параметрическое представление распределения давления в исследуемой области. Параметры этого распределения подбирались численно, из условий наилучшего соответствия теней измеренной в эксперименте и рассчитанной по плотности, полученной при решении газодинамической задачи по тестируемому распределению давления.

Используя описанную методику, были восстановлены параметры течения при детонации зарядов на основе ТАТБ (рис. 9, 10).

В результате обращения рентгеновской тени, полученной в эксперименте, удалось восстановить все механические параметры течения: $\rho(r, z), \vec{v}(r, z), p(r, z)$. При этом использовались только механические свойства системы, никаких предположений о ее термодинамике не делалось, хотя эта информация и определяет результат через измеренную в эксперименте плотность. Возвращаясь к термодинамическим свойствам, можно определить некоторые из них по полученным данным. В частности, удается построить адиабату разгрузки продуктов детонации в координатах давление–плотность (рис. 10).

Полученный результат разумно согласуется с часто используемым



Рисунок 10 – Динамика давления, плотности, массовой скорости и адиабаты разгрузки продуктов детонации вдоль линий тока. Заряд ТАТБ.

приближенным уравнением состояния в виде политропного газа, $p/\rho^{\gamma} = const.$ При этом, наилучшее соответствие для диапазона плотностей от 1.5–2.5 г/см³ достигается для $\gamma \approx 3$, что согласуется с данными работ [8, 9].

Для широкого круга составов, детонирующих без особенностей, описанная выше методика восстановления независимых полей плотности и давления дает избыточную информацию. Часто достаточно одного для всей расчетной области уравнения состояния $p = \Pi(\rho)$, в среднем хорошо описывающего все течение и определяющего параметры Чепмена-Жуге для плоского детонационного фронта.

В основе метода восстановления полей газодинамических характеристик детонационного течения лежит численное решение газодинамической задачи в постановке, соответствующей эксперименту. Рассмотрим задачу о цилиндрически симметричном нестационарном течении газа, в этом случае в эйлеровых координатах уравнения неразрывности, движения и баротропное уравнение состояния имеют вид:

$$\frac{\partial r\rho u}{\partial r} + \frac{\partial r\rho v}{\partial z} = \frac{\partial r\rho}{\partial t},$$

$$\frac{\partial r\rho u^2}{\partial r} + \frac{\partial r\rho uv}{\partial z} + r\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{\partial r\rho u}{\partial t},$$

$$\frac{\partial r\rho v^2}{\partial z} + \frac{\partial r\rho uv}{\partial r} + r\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\partial r\rho v}{\partial t},$$

$$p = \Pi(\rho),$$
(3)

где ρ – плотность, p – давление, u, v – осевая и радиальная компоненты вектора скорости, r, z – радиальная и осевая пространственные координаты, t – время; $\Pi(\rho)$ – тестируемое параметрическое уравнение состояния продуктов детонации.

Будем рассматривать детонационную волну, распространяющуюся по цилиндрическому заряду с начальной плотностью ρ_0 , с постоянной скоростью D и с плоским фронтом. В системе отсчета, связанной с фронтом, постановка соответствует сверхзвуковому истечению газовой струи. При этом по плоскому сечению детонационного фронта задавались однородные параметры потока, соответствующие условиям Чепмена-Жуге: поток массы – $\rho_0 D$, импульса – $\rho_0 D^2$.

Уравнение состояния подбиралось из условий простоты использования и удобства описания параметров Чепмена-Жуге

$$\Pi(\rho) = p_J(\rho/\rho_J)^{G(\rho)},\tag{4}$$

где p_J и ρ_J – параметры в точке Чепмена-Жуге, $G(\rho)$ – параметрическая зависимость показателя адиабаты от плотности.

Используемое уравнение состояния обладает следующими свойствами:

$$c = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)^{1/2} = \left[p_J(\rho/\rho_J)^{G(\rho)} \left(\frac{G(\rho)}{\rho} + G'(\rho)\ln(\rho/\rho_J)\right)\right]^{1/2}, \quad (5)$$

$$\gamma = \frac{\partial p}{\partial \rho} \frac{\rho}{p} = G(\rho) + \rho G'(\rho) \ln(\rho/\rho_J), \tag{6}$$

гдеc – скорость звука (скорость распространения возмущений), γ – дифференциальный показатель адиабаты.

Система дифференциальных уравнений (3) решалась численно методом Годунова, в Лагранжевых координатах, распады разрывов считались в акустическом приближение. Границы расчетных ячеек перемещались с массовой скоростью. Никаких дополнительных алгоритмов перестройки сетки не использовалось, до момента расширения области продуктов взрыва до двух диаметров сетка сохраняла приемлемое качество. Искомая функция $G(\rho)$ задавалась в виде кубического сплайна, проведенного через опорные точки: G(0), $G(\rho_1)$, $G(\rho_2)$, ..., $G(\rho_J)$. Приемлемых результатов удается добиться при использовании пяти равномерно расположенных узлов. Значения G_i в опорных узлах определялись численно из условий наилучшего соответствия экспериментальной рентгеновской тени и от тестируемого распределения плотности.

Таким образом, зная начальную плотность заряда ρ_0 и скорость детонации D, для фиксации уравнения состояния необходимо задать несколько промежуточных значений G. После этого можно решить газодинамическую задачу и определить все характеристики течения: p(r, z, t), $\rho(r, z, t)$ и $\vec{v}(r, z, t)$.

Используя описанную методику были исследованы заряды литого тротила (тринитротолуол): плотность 1.63 г/см³, диаметр 16 мм, скорость детонации 6.8 км/с. Численно решая систему уравнений газовой динамики (2) с соответствующим уравнением состояния (4), были восстановлены распределения газодинамических параметров детонационного течения на момент времени 3 мкс от момента инициирования (рис. 11).

Простое баротропное уравнение состояния в виде зависимости давления только от плотности $\Pi(\rho)$ (4) фактически является адиабатой Пуассона, связывающей давление с плотностью на изоэнтропе. Методика позволяет определять газодинамические параметры от условий Чепмена-Жуге до расширения по плотности в десять раз, а по давлению – до 10⁷ Па. Температура при этом остается совершенно неизвестной. Восстанавливаются только согласованные с уравнениями газовой динамики механические параметры течения.

Для построения адиабаты разгрузки в терминах давление– массовая скорость необходимо численно проинтегрировать соотношение на характеристике для одномерного нестационарного течения:

$$u(\rho) + \int_{\rho_J}^{\rho} \frac{c(\rho)}{\rho} d\rho = const = u_J, \tag{7}$$

где u – массовая скорость, $c(\rho)$ – зависимость скорости звука от плотности (5).

По соотношениям (4, 6, 7) были построены адиабаты разгрузки (рис. 12). Приведено сравнение с экспериментальными данными других авторов и моделью, описанной ниже.

Для состава тнт, рентгенографическая методика хорошо определила параметры детонации Чепмена-Жуге. Давление и массовая скорость в точке Чепмена-Жуге хорошо соответствуют экспериментальным данным других авторов.

Адиабата разгрузки, восстановленная из рентгенографического эксперимента, хорошо соответствует экспериментальным данным [10] и модели. От параметров в точке Чепмена-Жуге (2 г/см³, 20 ГПа) до 1 г/см³



Рисунок 11 – Пространственные распределения (а – (r, z), б – вдоль оси z) газодинамических параметров при детонации заряда тротила на момент времени 3 мкс от момента инициирования: давление, плотность, скорость звука, вектор массовой скорости и дифференциальный показатель адиабаты.



Рисунок 12 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации тротила: "рентгенография" – адиабата, восстановленная по данным рентгенографического эксперимента, "модель" – численная модель описанная далее, 1 – экспериментальные данные [10].

и 2 ГПа наблюдается стабилизация дифференциального показателя γ около 3, это хорошо соответствует часто используемому в физике взрыва приближению политропного газа. Для меньших плотностей и давлений наблюдается плавный переход к уравнению состояния разреженного газа с показателем адиабаты несколько большим единицы.

В третьей главе приводится описание двух моделей уравнения состояния реагирующих газовых смесей и газовзвесей для описания процессов горения и детонации.

Для разреженных газов, используя методы статистической физики, реализована модель термодинамики реагирующей смеси газов и конденсированных компонент. Для определения детального равновесного химического состава рассматривается NVT ансамбль и численно находится минимум свободной энергии смеси всех возможных компонент.

Вторая модель позволяет проводить расчеты равновесных термодинамических параметров плотных реагирующих газов и флюидов с учетом межмолекулярных взаимодействий. Протестированный диапазон параметров составляет по температуре – от 100 до 10 000 К и до давлений 100 ГПа. Базовыми параметрами для заданных условий являются плотность, температура и химический элементный состав исследуемой смеси.

Для определения свойств индивидуальных компонент, используя

подход работы [11], введем табличную функцию f(T), характеризующую внутренние степени свободы молекулы:

$$f(T) = \ln\left(\frac{kT}{p_0} \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \sum_k e^{-\varepsilon'_k/kT}\right),\tag{8}$$

где T – температура, p_0 – давление при нормальных условиях, суммирование ведется по всем по всем энергиям ε'_k .

Выразим через нее свободную энергию F,удельную внутреннюю энергию и энтальпию на моль вещества e^{ν} и $h^{\nu}.$

Для газов

$$F(T, V, \nu) = \nu \left[e_0^{\nu} - RT \left(1 + f(T) + \ln \left(\frac{p_0 V}{\nu RT} \right) \right) \right],$$

$$e^{\nu}(T) = e_0^{\nu} + RT^2 \frac{\partial f(T)}{\partial T} - RT,$$

$$h^{\nu}(T, p) = e_0^{\nu} + RT^2 \frac{\partial f(T)}{\partial T};$$

(9)

где ν это количество молей рассматриваемого вещества, e_0^{ν} – энергия формирования одного моля молекул из атомов при нуле градусов Кельвина, R – универсальная газовая постоянная, V – объем.

Для конденсированных компонент:

$$F(T, V, \nu) = \nu \left[e_0^{\nu} - RT \left(1 + f(T) \right) \right],$$

$$e^{\nu}(T) = e_0^{\nu} + RT^2 \frac{\partial f(T)}{\partial T} - p_0 \mu / \rho_0,$$

$$h^{\nu}(T, p) = e_0^{\nu} + RT^2 \frac{\partial f(T)}{\partial T} + (p - p_0) \mu / \rho_0;$$

(10)

где μ – молярная масса компоненты, ρ_0 – ее неизменная плотность.

Приведенный подход позволяет описывать сложную зависимость теплоемкости от температуры (рис. 13). Для определения термодинамических характеристик индивидуальных компонент использовались данные из [11–16].

Для определения давления и внутренней энергии плотного газа взаимодействующих молекул с известным химическим составом численно решалась задача классической молекулярной динамики. Рассматривался 3d NVT ансамбль в кубическом объеме с периодическими граничными условия.

В качестве межмолекулярного взаимодействия использовался парный центральный потенциал exp-6 и соответствующая ему сила:

$$U(r) = \frac{\varepsilon}{1 - 6/\alpha} \left(\left(\frac{6}{\alpha}\right) \exp\left(\alpha \left(1 - \frac{r}{b}\right)\right) - \left(\frac{b}{r}\right)^6 \right),$$



Рисунок 13 – Зависимости теплоемкости от температуры одного моля атомов He, N_2 и конденсированного углерода (графит).

$$F(r) = -\frac{\partial U}{\partial r} = \frac{6\varepsilon/b}{1 - 6/\alpha} \left(\frac{1}{\alpha} \exp\left(\alpha \left(1 - \frac{r}{b}\right)\right) - \left(\frac{b}{r}\right)^{7}\right),$$

где r модуль расстояния; ε , b и α параметры потенциала взаимодействия между двумя рассматриваемыми молекулами. Как было показано в работах других авторов, например [17], потенциал exp-6 хорошо описывает детонационные и ударно-волновые процессы до давлений 50 ГПа.

Параметры потенциала ехр-6 между молекулами одного вида i определялись через критическую температуру T_c и плотность ρ_c . Для этого использовались свойства фазовой диаграммы состояний более простой, хорошо исследованной системы частиц, взаимодействующих с потенциалом Леннард-Джонса $U_{LJ}(r) = 4\varepsilon_{LJ}\left(\left(\frac{b_{LJ}}{r}\right)^{12} - \left(\frac{b_{LJ}}{r}\right)^6\right)$, где r модуль расстояния; ε_{LJ} и b_{LJ} параметры потенциала взаимодействия между двумя рассматриваемыми молекулами. Для этой системы диаграмма фазовых состояний хорошо изучена, и для параметров критической точки можно использовать соотношения: $kT_c/\varepsilon_{LJ} = 1.326$, $\rho_c b_{LJ}^3/m = 0.316$, где m – масса молекулы [18].

Потенциалы exp-6 и Леннард-Джонса схожи в области межмолекулярных расстояний вблизи положения равновесия. Можно показать, что при выборе параметров потенциалов в соотношении $\varepsilon = \varepsilon_{LJ}$, $b = 1.22b_{LJ}$ для расстояний r/b > 1 потенциалы близки.

Таким образом, по модифицированным соотношения: $kT_c/\varepsilon_{ii}=1.326,\,\rho_c(b_{ii}/1.22)^3/m_i=0.316$ подбирались два параметра потенциала ехр-6 для молекул одного вида.

Параметр потенциала α в основном влияет на уравнение состояния при больших сжатиях, для межатомных расстояний r/b меньше 0.75. В этих условиях потенциал exdp-6 мягче потенциала Леннард-Джонса и лучше описывает взаимодействие молекул в диапазоне десятков ГПа. Значение безразмерного параметра α подбиралось в диапазона 10-14 из условий наилучшего соответствия ударным адиабатам сжиженных газов в указанном диапазоне давлений.

Для перекрестных компонент использовалось усреднение параметров: $b_{ij} = 0.5(b_{ii} + b_{jj}), \varepsilon_{ij} = (\varepsilon_{ii} * \varepsilon_{jj})^{1/2}, \alpha_{ij} = 0.5(\alpha_{ii} + \alpha_{jj}).$

В моделируемой системе объема V при температуре T из N взаимодействующих частиц, давление p и внутренняя энергия системы E определяются по следующим соотношениям:

$$pV = NkT - 1/6\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N'} r_{ij}F(r_{ij}),$$
(11)

$$E = 1/2 \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i}^{N'} U(r_{ij}) + \sum_{i=1}^{N} N_i / N_A e_i^{\nu}(T).$$
(12)

В слагаемых с двойной суммой перебираются все пары взаимодействующих частиц с учетом периодических граничных условий. Во внешней сумме перебираются все реальные частицы в расчетной области $(1 \dots N)$, во внутренней сумме перебираются все частицы в расчетной области и фиктивные частицы, являющиеся отражениями для реализации периодических граничных условий.

Для решения уравнений движения использовался явный численный метод Верле в скоростной форме. Для поддержания заданной температуры использовался простой метод масштабирования скоростей – термостат Берендзена [19].

По аналогии с работами [20–22], для определения равновесного химического состава использовался методом ансамбля реагирующих частиц (Reactive Monte Carlo).

В методе рассматривается механика движения относительно небольшого количества (десятки штук) молекул разного вида, взаимодействующих с заданными парными потенциалами в кубическом объеме с периодическими граничными условиями при фиксированной температуре – NVT ансамбль.

Несмотря на взаимодействие, энергия внутренних степеней свободы молекул (вращения, колебания и электронные возбуждения) (9) и статистический вес q вычислялись как для разреженных газов. Полная энергия системы E вычисляется по (12).

При фиксированных V и T вероятность нахождения системы в состоянии с химическим составом $N_1, N_2, \dots N_l$ пропорциональна выражению

$$\sim \prod_{i} \left(q_i^{N_i} / N_i! \right) e^{-E/kT},\tag{13}$$

где $q_i = V \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \sum_k e^{-\varepsilon'_k/kT}$ вычисляется через (8).

Для примера опишем нахождение равновесного химического состава смеси из молекул вида *A* и *B*. Между компонентами возможна прямая и обратная реакции с балансом aA + bB = 0. Из текущего состояния с химическим составом N_A , N_B и энергией E_0 система может перейти в три других состояния. Обозначим вероятности этих состояний через w_0 , w_f и w_r соответственно: с текущим химическим составом: N_A , N_B и энергией E_0 ; после прямой реакции: $N_A \to N_A + a$, $N_B \to N_B + b$, E_f ; и после обратной: $N_A \to N_A - a$, $N_B \to N_B - b$, E_r ;

$$w_0 = \frac{q_A{}^{N_A}}{N_A!} \frac{q_B{}^{N_B}}{N_B!} e^{\frac{-E_0}{kT}},$$
(14)

$$w_f = \frac{q_A{}^{N_A+a}}{(N_A+a)!} \frac{q_B{}^{N_B+b}}{(N_B+b)!} e^{\frac{-E_f}{kT}},$$
(15)

$$w_r = \frac{q_A^{N_A - a}}{(N_A - a)!} \frac{q_B^{N_B - b}}{(N_B - b)!} e^{\frac{-E_r}{kT}}.$$
(16)

Для определения каждой вероятности задавался соответствующий химический состав в моделируемом ансамбле молекул. По (12) проводилось вычисление и усреднение полной энергии системы.

Согласно вероятностям w_0, w_f, w_r случайно выбирался новый химический состав. При этом возможны все три исхода: состав не изменился, произошла прямая или обратная реакция. По этим правилам строилась последовательность Маркова из тестируемых химических составов. Проводилось усреднение химического состава, давления и полной внутренней энергии системы.

В описанном подходе базовыми являются зависимости давления pи внутренней энергии на единицу массы e от плотности и температуры. Таким образом, рассмотрев NVT ансамбль, вычислялись базовые зависимости равновесного химического состава, давления и внутренней энергии от плотности и температуры. Численно вычислялись частные производные $\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T, \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_o, \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_T, \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_o$.

Остальные характеристики вычисляются по термодинамическим соотношениям:

$$c_{v} = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{\rho},$$

$$c_{p} = c_{v} + \left(\frac{p}{\rho^{2}} - \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_{T}\right) \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{\rho} / \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{T},$$

$$c_{sound} = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{S}^{1/2} = \left(\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{T} \frac{c_{p}}{c_{v}}\right)^{1/2},$$

$$\gamma = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{S} \frac{\rho}{p} = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{T} \frac{c_{p}}{c_{v}} \frac{\rho}{p},$$
(17)



Рисунок 14 – Изотермы в координатах давление-плотность. Сплошные линии – вычисление по модели, символы – экспериментальные данные. а – азота (N_2), символы – данные Института стандартов США [16]; б – флюида CO_2 : NIST – [16], Liu – [23].

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_{S} = \left(p/\rho^{2} - \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_{T}\right) / \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_{\rho}.$$
(18)

Где c_v и c_p – теплоемкости при постоянном объеме и давлении, c_{sound} – равновесная скорость звука (с учетом меняющегося химического состава), γ – дифференциальный показатель адиабаты.

Для ряда химических компонент было проведено сравнение модели с данными Института стандартов США [16]. До давлений 1 ГПа проведено сравнение зависимостей давления от плотности для изотерм 0.6, 1.0 и 2.0 критических температур. Для примера представлены изотермы для азота и воды (рис. 14, а). Для компонент Ar, Ne, He, Kr, O₂, H₂, N₂, CO, CO₂, H₂O, CH₄, NH₃ удается подобрать параметры потенциалов молекулярного взаимодействия и хорошо описать поведение плотных газов до давлений 1 ГПа.

Используя данные по сжатию в алмазных наковальнях, проведена калибровка модели в широком диапазоне давлений, для некоторых составов – до давления 100 ГПа (рис. 14, б). Температура при этом обычно не превышает нескольких сотен градусов Кельвина.

Для ряда химических компонент было проведено сравнение модели с банком данных ударных адиабат сжиженных газов [24].

Для построения ударной адиабаты численно решалось нелинейное уравнение Гюгонио

$$(e - e_0) - \frac{p + p_0}{2} \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right) = 0, \tag{19}$$



Рисунок 15 – Ударная адиабата сжиженного азота: $T_0 = 77.4$ K, $\rho_0 = 0.808$ г/см³. Сплошные линии – вычисление по модели, 1 – данные сборника [24], 2 – данные [25].

где e – плотность внутренней энергии на единицу массы, p – давление, ρ – плотность. e и p являются зависимостями от температуры T и плотности ρ .

Для решения (19) при заданных начальных параметрах смеси ρ_0 и T_0 вычислялись E_0 и p_0 . Интенсивность волны фиксировалась заданием температуры ударносжатого материала T, при этом в уравнении Гюгонио оставался один неизвестный параметр ρ , который находился численно.

Для большинства химических компонент (Ar, Ne, He, Kr, O_2 , H_2 , N_2 , CO, CO_2 , H_2O , CH_4 , NH_3) проведено сравнение зависимостей давления от плотности вдоль ударной адиабаты сжиженных газов (рис. 15).

Для определения параметров детонации Чепмена-Жуге строилась ударная адиабата продуктов взрыва (19), и численно определялась точка с условиями D = u + c, где $D = \left[1/\rho_0^2(p - p_0)/(1/\rho_0 - 1/\rho)\right]^{1/2}$ – скорость фронта, $u = \left[(p - p_0)(1/\rho_0 - 1/\rho)\right]^{1/2}$ – массовая скорость, c – равновесная скорость звука в продуктах взрыва, определяемая по соотношению (17). Начальная плотность энергии e_0 вычислялась из стандартной энтальпии образования исходных компонент детонирующей смеси.

Было проведено тестирование на индивидуальных энергетических материалах и смесях. При условии отсутствия конденсированной фазы углерода или при небольшом его количестве (менее 5 массовых процентов) модель демонстрирует хорошее согласие с экспериментальными данными. Для тэна (рис. 16 а) приведено подробное сравнение модели и доступных экспериментальных данных. Механические параметры течения – скорость волны и давление – очень хорошо для взрывного эксперимента предсказываются моделью.

Для смесей, формирующих большое количество (более 5 массовых процентов) конденсированного углерода, наблюдается некоторое отклонение модели от экспериментальных данных. Для таких составов удается



б)

Рисунок 16 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности: а – для тэна (C₅H₈N₄O₁₂, $\Delta_f H^{\circ}_{cond} = -1.704 \text{ MДж/kr}$); 6 – для тротила (C₇H₅N₃O₆, $\Delta_f H^{\circ}_{cond} = -0.328 \text{ MДж/kr}$). Сплошные линии – вычисления по модели, 1 – данные работы [26], 2 – [27].



Рисунок 17 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации заряда тротила с начальной плотностью $\rho_0 = 1.63 \text{ г/см}^3$. СНЕЕТАН – [28], экспериментальные данные – [10].

добиться только качественной предсказательной силы модели (рис. 16 б). Результаты более полного сравнения с широким набором взрывчатых составов приведены в приложении.

Используя соотношение (18) в базовых параметрах плотность и давление численно строилась адиабата разгрузки продуктов детонации (рис. 17).

Численно интегрируя инвариант Римана, используя соотношения (18) и (17),

$$u(\rho) + \int_{\rho_J}^{\rho} \frac{c(\rho)}{\rho} d\rho = const = u_J,$$
(20)

получаем соотношение в волне разрежения между давлением и массовой скоростью (рис. 17).

Описанная модель реализована в виде программного комплекса удаленных вычислений термодинамических параметров и простых течений (http://ancient.hydro.nsc.ru/chem) со следующими возможностями.

- Вычисление ряда термодинамических параметров и равновесного химического состава смеси газов: Ar, Ne, He, Kr, N₂, N, O₂, O, H₂, H, H₂O, OH, NH₃, CO, CO₂, CH₄, NH₃, NO и конденсированного углерода в широком диапазоне параметров. Для ряда компонент в промежутке от 200 до 6 000 К и давлений до 50 ГПа.
- Решение уравнения Гюгонио и построение равновесных и замороженных ударных адиабат. Определение параметров детонации Чепмена-Жуге взрывчатых смесей.

На разработанный программный комплекс получены свидетельства о государственные регистрации программ для ЭВМ [29, 30]. В заключении приведены полученные результаты, обозначены направления развития экспериментальных методик и модели уравнения состояния.

- 1. Модернизирована экспериментальная станция для исследования детонационных процессов с помощью синхротронного излучения на ускорителе ВЭППЗ ИЯФ СО РАН. Станция позволят проводить рентгенографические исследования с рекордными возможностями: массами зарядов до 50 г, широким полем наблюдения 40 мм и временем между рентгеновскими кадрами 124 нс. Даже с учетом некоторой конкуренции со стороны других ускорителей, комплекс характеристик модернизированной станции масса исследуемых зарядов, поле наблюдения и временное разрешение является уникальным.
- 2. Реализована оригинальная методика, позволяющая определять распределение газодинамических параметров цилиндрическисимметричного течения: плотности $\rho(r, z, t)$, давления p(r, z, t), вектора массовой скорости $\vec{v}(r, z, t)$ и адиабаты разгрузки продуктов детонации в виде политропного уравнения состояния $p(\rho)$. Получены параметры Чепмена-Жуге и адиабаты разгрузки продуктов детонации ряда взрывчатых составов.
- 3. Реализована модель уравнения состояния плотных газов с учетом равновесного химического состава. Модель основывается на классическом молекулярно-динамическом моделировании небольшого ансамбля взаимодействующих молекул и прямом определении давления и полной энергии системы. При этом равновесный состав подбирается методом реагирующего ансамбля Монте-Карло (Reactive Monte Carlo). Модель позволяет определять термодинамические параметры плотных газов в условиях взрыва в диапазоне температур от нормальных условий до 5 000 К и давлений до 50 ГПа.

В приложении приведено сравнение модели с экспериментальными данными Института стандартов США, сжатием до больших давлений в алмазных наковальнях, ударными адиабатами сжиженных газов и детонационными характеристиками энергетических материалов.

Список литературы

Development of the microstrip silicon detector for imaging of fast processes at a synchrotron radiation beam / V. Aulchenko, E. Pruuel, L. Shekhtman, K. Ten, B. Tolochko, V. Zhulanov // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2017. — Vol. 845. — P. 169–172. — DOI: 10.1016/j.nima.2016.05.096. — URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900216304880.

- Upgrade of the Detector for Imaging of Explosions / L. I. Shekhtman, V. M. Aulchenko, V. N. Kudryavtsev, V. D. Kutovenko, V. M. Titov, V. V. Zhulanov, E. R. Pruuel, K. A. Ten, B. P. Tolochko // Physics Procedia. — 2016. — Vol. 84. — P. 189–196. — DOI: 10.1016/j. phpro.2016.11.033. — URL: http://www.sciencedirect.com/ science/article/pii/S1875389216303285.
- GEM-based detectors for SR imaging and particle tracking / L. I. Shekhtman, V. M. Aulchenko, A. E. Bondar, A. D. Dolgov, V. N. Kudryavtsev, D. M. Nikolenko, P. A. Papushev, E. R. Pruuel, I. A. Rachek, K. A. Ten, V. M. Titov, B. P. Tolochko, V. N. Zhilich, V. V. Zhulanov // Journal of Instrumentation. 2012.
- A detector for imaging of explosions on a synchrotron radiation beam / V. M. Aulchenko, O. V. Evdokov, I. L. Zhogin, V. V. Zhulanov, E. R. Pruuel, B. P. Tolochko, K. A. Ten, L. I. Shekhtman // Instruments and Experimental Techniques. — 2010. — Vol. 53, N 3. — P. 334–349. — ISSN 1608-3180. — DOI: 10.1134/S0020441210030036.
- Fast high resolution gaseous detectors for diffraction experiments and imaging at synchrotron radiation beam / V. M. Aulchenko, S. E. Baru, O. V. Evdokov, V. V. Leonov, P. A. Papushev, V. V. Porosev, G. A. Savinov, M. R. Sharafutdinov, L. I. Shekhtman, K. A. Ten, V. M. Titov, B. P. Tolochko, A. V. Vasiljev, I. L. Zhogin, V. V. Zhulanov // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. — 2010. — Vol. 623. — P. 600–602. — DOI: 10.1016/j.nima.2010.03.083. — URL: http: //ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2010/2010_nim.pdf.
- Измерение распределения плотности при детонации ВВ с помощью синхротронного излучения / К. А. Тен, В. М. Аульченко, О. В. Евдоков, И. Л. Жогин, В. В. Жуланов, П. И. Зубков, Г. Н. Кулипанов, Л. А. Лукьянчиков, Н. З. Ляхов, Е. В. Мамонтов, Л. А. Мержиевский, В. М. Титов, Б. П. Толочко, М. Р. Шарафутдинов, М. А. Шеромов // Сборник докладов. Физика экстремальных состояний вещества – 2003. — 2003. — С. 40–42.
- 7. *Марчук Г. И.* Методы вычислительной математики. Москва: Наука, 1977. 456 с.
- Физика взрыва / Ф. А. Баум, Л. П. Орленко, К. П. Станюкович, В. П. Челышев, Б. И. Шехтер. — Москва: Наука, 1975. — 704 с.
- Детонационные волны в конденсированных средах / А. Н. Дремин, С. Д. Савров, В. С. Трофимов, К. К. Шведов. — М: Наука, 1970. — 164 с.

- Евстигнеев А., Жерноклетов М., Зубарев В. Изэнтропическое расширение и уравнение состояния продуктов взрыва тротила // Физика горения и взрыва. — 1976. — Т. 12, № 5. — С. 758-763. — URL: https://www.sibran.ru/upload/iblock/ 540/540161ec653874756f25fd1f02beaa0f.pdf.
- 11. *Глушко В. П.* Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Тома I, II, II, IV. Москва: Наука, 1978.
- 12. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Тома V, VI [Электронный ресурс] / под ред. В. С. Иориш. — URL: http://www. chem.msu.su/Zn.
- 13. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. База данных Ивтантермо [Электронный ресурс]. URL: http://www.chem.msu.su/rus/handbook/ivtan.
- The IVTANTHERMO-Online database for thermodynamic properties of individual substances with web interface / G. V. Belov, S. A. Dyachkov, P. R. Levashov, I. V. Lomonosov, D. V. Minakov, I. V. Morozov, M. A. Sineva, V. N. Smirnov // Journal of Physics: Conference Series. - 2018. -T. 946. - C. 012120. - DOI: 10.1088/1742-6596/946/1/012120.
- 15. *Сталл Д., Вестрам Э., Зинке Г.* Химическая термодинамика органических соединений. Москва: Мир, 1971. 807 с.
- 16. Linstrom P. J., Mallard W. G. NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69 [Электронный ресурс]. – DOI: 10.18434/T4D303. – URL: https://webbook.nist.gov/chemistry.
- Thermodynamic modelling of detonation H-N-O high explosives / Y. A. Bogdanova, S. A. Gubin, A. A. Anikeev, S. B. Victorov // Journal of Physics: Conference Series. — 2018. — Vol. 751. — P. 012018. — DOI: 10.1088/1742-6596/751/1/012018.
- Potoff J. J., Panagiotopoulos A. Z. Critical point and phase behavior of the pure fluid and a Lennard-Jones mixture // The Journal of Chemical Physics. — 1998. — Vol. 109, N 24. — P. 10914–10920. — DOI: 10.1063/1.477787.
- Molecular dynamics with coupling to an external bath / H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren, A. DiNola, J. R. Haak // The Journal of Chemical Physics. — 1984. — Vol. 81, N 8. — P. 3684– 3690. — DOI: 10.1063/1.448118.
- 20. Замалин В. М., Норман Г. Э., Филинов В. С. Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. Москва: Наука, 1977. 229 с.
- Johnson J. K., Panagiotopoulos A. Z., Gubbins K. E. Reactive canonical Monte Carlo // Molecular Physics. — 1994. — Vol. 81, N 3. — P. 717– 733. — DOI: 10.1080/00268979400100481.

- 22. Smith W. R., Triska B. The reaction ensemble method for the computer simulation of chemical and phase equilibria. I. Theory and basic examples // The Journal of Chemical Physics. 1994. Vol. 100, N 4. P. 3019–3027. DOI: 10.1063/1.466443.
- 23. Liu L.-g. Compression and phase behavior of solid CO₂ to half a megabar // Earth and Planetary Science Letters. 1984. T. 71, № 1. C. 104-110. ISSN 0012-821X. DOI: 10.1016/0012 821X(84) 90056 6. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0012821X84900566.
- 24. Bushman A. V., Lomonosov I. V., Khishchenko K. V. Shock Wave DataBase [Электронный ресурс]. URL: www.ihed.ras.ru/rusbank (visited on 09/16/2021).
- 25. Equation-of-state, shock-temperature, and electrical-conductivity data of dense fluid nitrogen in the region of the dissociative phase transition / W. J. Nellis, H. B. Radousky, D. C. Hamilton, A. C. Mitchell, N. C. Holmes, K. B. Christianson, M. van Thiel // The Journal of Chemical Physics. 1991. T. 94, № 3. C. 2244-2257. DOI: 10.1063/1. 459895.
- 26. Equation of state of detonation products / H. Hornig, E. L. Lee, M. Finger, J. E. Kurrle // Proc. 5th Symposium (International) on Detonation. 1970. P. 503-512. URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/biblio/eq/horning_1970.pdf.
- 27. Воскобойников И. М., Алин А. Я. Измерение температуры детонационного фронта взрывчатых веществ // Доклады Академии наук СССР. — 1960. — Т. 130, № 4. — С. 804-806. — URL: http://www. mathnet.ru/php/getFT.phtml?jrnid=dan&paperid=39602&what= fullt&option_lang=rus.
- 28. *Кул А. Л.* О структуре автомодельных детонационных волн в зарядах тротила // Физика горения и взрыва. — 2015. — Т. 51, № 1. — С. 87–95. — URL: https://www.sibran.ru/upload/iblock/f2a/ f2ae2f55905964092af346444593d474.pdf.
- 29. Прууэл Э. Р. Метод расчета равновесного химического состава и термодинамических параметров плотных газов. Свидетельство государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019666436. — 2019.
- 30. Прууэл Э. Р., Анисичкин В. Ф. Метод расчета равновесных ударных адиабат в плотных газах. Свидетельство государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019666437. 2019.

Список статей с определяющим вкладом автора, опубликованных в журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией при Министерстве образования и науки Российской Федерации, и в ведущих международных журналах.

- High-speed X-ray transmission tomography for detonation investigation / O. V. Evdokov, A. N. Kozyrev, V. V. Litvinenko, L. A. Lukianchikov, L. A. Merzhievsky, E. R. Pruuel, K. A. Ten, B. P. Tolochko, I. L. Zhogin, P. I. Zubkov // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2007. — Vol. 575, N 1. — P. 116–120.
- Распределение плотности разлетающихся продуктов стационарной детонации тротила / Э. Р. Прууэл, Л. А. Мержиевский, К. А. Тен, П. И. Зубков, Л. А. Лукьянчиков, Б. П. Толочко, А. Н. Козырев, В. В. Литвенко // Физика горения и взрыва. — 2007. — Т. 43, № 3. — С. 121–131.
- Tomography of the flow field of detonation product using SR / K. A. Ten, E. R. Pruuel, L. A. Merzhievsky, L. A. Lukjanchikov, B. P. Tolochko, I. L. Zhogin, L. I. Shekhtman // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2009. — Vol. 603, N 1. — P. 160–163.
- 4. X-ray Transmission Tomography for Detonation Investigation / E. R. Pruuel, K. A. Ten, V. M. Titov, L. A. Lukianchikov, L. A. Merzhievsky, P. I. Zubkov, B. P. Tolochko, I. L. Zhogin, V. Zhulanov, V. M. Aulchenko, L. I. Shekhtman // Proceedings Fourteenth International Detonation Symposium. - 2010. - P. 345-351.
- Опыт применения синхротронного излучения для исследования детонационных процессов / В. М. Титов, Э. Р. Прууэл, К. А. Тен, Л. А. Лукьянчиков, Л. А. Мержиевский, Б. П. Толочко, В. В. Жуланов, Л. И. Шехтман // Физика горения и взрыва. 2011. Т. 47, № 6. С. 3–15.
- Реализация возможностей синхротронного излучения в исследованиях детонационных процессов / Э. Р. Прууэл, К. А. Тен, Б. П. Толочко, Л. А. Мержиевский, Л. А. Лукьянчиков, В. М. Аульченко, В. В. Жуланов, Л. И. Шехтман, В. М. Титов // Доклады Академии наук. Техническая физика. 2013. Т. 448, № 1. С. 38–42.
- Исследование ударно-волновых переходных процессов во взрывчатых веществах с помощью синхротронного излучения / К. А. Тен,
 Э. Р. Прууэл, А. О. Кашкаров, Л. А. Лукьянчиков, Л. А. Мержиевский, Ю. А. Аминов, Е. Б. Смирнов, А. К. Музыря, О. В. Костицын // Известия РАН. Серия физическая. 2013. Т. 77, № 2. С. 254–256.
- Исследование параметров детонационной волны и процессов конденсации в БТФ синхротронными методами / К. А. Тен, В. М. Титов,
 Э. Р. Прууэл, Л. А. Лукьянчиков, Б. П. Толочко, В. В. Жуланов,

Л. И. Шехтман, Ю. А. Аминов, А. К. Музыря, О. В. Костицын, Е. Б. Смирнов // Научный вестник НГТУ. — 2013. — Т. 50, № 1. — С. 128–138.

- 9. Tomography of gas-dynamic characteristics of the detonation flow / E. R. Pruuel, K. A. Ten, V. M. Titov, A. O. Kashkarov, L. A. Merzhievsky, A. K. Muzyrya, E. B. Smirnov, K. M. Prosvirnin // Proceedings Fifteenth International Detonation Symposium. — 2015. — P. 1219–1224.
- Kashkarov A. O., Ershov A. P., Pruuel E. R. On peculiarities of nearthreshold initiation of powder density explosive by air shock wave and by solid impactor // Journal of Physics: Conference Series. — 2016. — Vol. 754. — P. 052001.
- Measurements of detonation propagation in the plastic explosive in charges of small diameters using synchrotron radiation / A. O. Kashkarov, E. R. Pruuel, K. A. Ten, I. A. Rubtsov, S. I. Kremenko, K. M. Prosvirnin, A. N. Kiselev, I. E. Kosolapov, O. V. Kostitsyn, B. G. Loboyko, A. K. Muzyrya // Journal of Physics: Conference Series. - 2017. - Vol. 899. - P. 042004.
- Восстановление синхротронным излучением газодинамических характеристик течения при детонации гексанитрогексаазаизовюрцитана по данным рентгеновской томографии / И. А. Рубцов, Э. Р. Прууэл, К. А. Тен, А. О. Кашкаров, С. И. Кременко, И. А. Спирин, Е. В. Халдеев // Боеприпасы XXI век. 2018. № 2. С. 182–185.
- Прууэл Э. Р., Васильев А. А. Уравнение состояния продуктов газовой детонации. Учет формирования конденсированной фазы углерода // Физика горения и взрыва. — 2021. — Т. 57, № 5. — С. 74–85.
- Детонация ультрадисперсных взрывчатых веществ / А. П. Ершов,
 В. В. Андреев, А. О. Кашкаров, Я. Л. Лукьянов, Д. А. Медведев,
 Э. Р. Прууэл, И. А. Рубцов, Н. П. Сатонкина, С. А. Соловьев // Физика горения и взрыва. — 2021. — Т. 57, № 3. — С. 111–118.

Подписано в печать	августа 2022 г.	Заказ № 313
Формат бумаги 60х84 1	/16	Объем 2.0 п.л.
Тираж 100 экз.		Бесплатно

Ротапринт Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН 630090 Новосибирск, просп. акад. Лаврентьева 15