Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева
Сибирского отделения Российской академии наук

На правах рукописи

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

Диссертация
на соискание степени доктора физико-математических наук

Новосибирск
2022

Оглавление

Введение **6**

1 Развитие пучковых методов исследования быстропротекающих процессов **16**

1.1 Применение СИ для исследования динамических процессов . . . 16

1.2 Станция исследования динамических процессов на ускорительном комплексе ВЭПП-3 . . . 18

1.2.1 Немного истории . . . 18

1.2.2 Параметры станции на ВЭПП3 . . . 20

1.3 Тенденции развития пучковых методов исследований с высоким временным разрешением . . . 23

1.3.1 Станции-аналоги . . . 23

1.3.2 Конкурентные научные ниши . . . 29

1.4 Рентгенография детонационного течения . . . 30

1.4.1 Общие характеристики рентгенографического эксперимента . . . 30

1.4.2 Калибровка и восстановление массы на луче . . . 33

1.4.3 Пример результатов продольных измерений . . . 34

1.4.4 Пример результатов поперечных измерений . . . 38

1.5 Заключение . . . 39

2 Восстановление газодинамических параметров течения **41**

2.1 Восстановление распределения плотности . . . 41

2.1.1 Восстановление плотности объекта по одному сечению . 41

2.1.2 Восстановление плотности объекта по нескольким временным сечениям . . . 44

2.1.3 Заключение . . . 53

2.2 Восстановление газодинамических параметров детонационного течения . . . 54
2.2.1 Восстановление параметров течения по известному распределению плотности . . . 54
2.2.2 Восстановление параметров течения по известному распределению давления . . . 59
2.2.3 Восстановление баротропного уравнения состояния продуктов детонации . . . 68
2.2.4 Заключение . . . 76
2.3 Параметры детонационного течения и адиабаты разгрузки продуктов взрыва . . . 77
2.3.1 Адиабата Пуассона и инварианты Римана . . . 77
2.3.2 Детонационные параметры тротила . . . 78
2.3.3 Детонационные параметры ТАТБ . . . 81
2.3.4 Детонационные параметры ГАВ . . . 83
2.3.5 Детонационные параметры БТФ . . . 84
2.3.6 Детонационные параметры гексогена . . . 86
2.3.7 Заключение . . . 87
2.4 Заключение . . . 87

3 Модель уравнения состояния плотных реагирующих газов 89
3.1 Обзор уравнений состояния . . . 89
3.1.1 Ключевые подходы . . . 89
3.1.2 Современное состояние . . . 94
3.2 Уравнение состояния разреженных реагирующих газов . . . 95
3.2.1 Термодинамика одной химической компоненты . . . 96
3.2.2 Термодинамика смеси с замороженным химическим составом . . . 101
3.2.3 Термодинамика реагирующей смеси . . . 102
3.2.4 Тестирование и сравнение с экспериментом . . . 105

3.2.5 Программный комплекс термодинамических расчетов для разреженных газов . . . 111
3.2.6 Заключение . . . 114
3.3 Уравнение состояния плотных реагирующих газов . . . 114
3.3.1 Термодинамические параметры плотного газа взаимодействующих молекул . . . 114
3.3.2 Определение равновесного химического состава . . . 118
3.3.3 Подбор параметров и тестирование модели . . . 122
3.3.4 Программный комплекс термодинамических расчетов для плотных реагирующих газов . . . 132
3.3.5 Заключение . . . 134
3.4 Заключение . . . 137

Заключение **138**

Список литературы **141**

А Параметры модели уравнения состояния **168**

Б Калибровка модели. Параметры ударных волн **170**
Б.1 H_2 . . . 170
Б.2 N_2 . . . 171
Б.3 O_2 . . . 172
Б.4 CO . . . 173
Б.5 CO_2 . . . 174
Б.6 H_2O . . . 176
Б.7 CH_4 . . . 177
Б.8 NH_3 . . . 178

В Калибровка модели. Параметры детонации Чепмена-Жуге **179**
В.1 Аммиачная селитра . . . 181
В.2 Эмульсионное ВВ на основе аммиачной селитры . . . 183

B.3 Тэн 185
B.4 Гексоген 187
B.5 Октоген 189
B.6 Тротил 191
B.7 Тротил + гексоген 193
B.8 Татб 195
B.9 ГНС 197
B.10 ГАВ 199
B.11 БТФ 201

Г Вклад Э.Р. Прууэла в совместные публикации **203**

Введение

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. Источник излучения и детектор позволяют снимать рентгеновское одномерное щелевое "кино" из 100 кадров, с полем наблюдения 40 мм и временем между кадрами 124 нс. Высокая стабильность характеристик излучения и соответствующая калибровка позволяют получать количественные характеристики исследуемых течений.

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 конденсирован-

ных 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 данными Американского института стандартов, данными сжатия в алмазных наковальнях, ударными адиабатами сжиженных газов и зависимостями детонационных параметров от начальной плотности заряда. Модель хорошо описывает детонационные параметры для составов, образующих небольшое количество конденсированного углерода. Для взрывчатых составов, образующих большое количество свободного углерода (более 10 процентов массы), точность модели несколько хуже, но остается приемлемой для большинства приложений.

Результаты работы представлены в работах [1–41].

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 разработки 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.

Экспериментальная методика и программный комплекс уже используется для решения научных и технологических задач.

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 излу-

чения. 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, является актуальной научной задачей.

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

Ряд результатов работы являются 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 цилиндрически-симметричного 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 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 позволяет получать количественные характеристики параметров детонационного течения.

Методика 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, а именно:

- Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина (ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»), г. Снежинск;

- Федеральное государственное унитарное предприятие Российский федеральный ядерный центр Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, г. Саров.

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

- АО Корпорация «Тактическое ракетное вооружение», Акционерное общество "Государственный научно-исследовательский институт машиностроения" им. В.В. Бахирева (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, образующихся при добыче полиметаллических руд в шахтах. Были выработаны рекомендации для предприятий г. Норильска.

Методология и методы исследования

Для достижения поставленных целей в работе использовались согласованные экспериментальные и теоретические подходы. Для определения параметров детонационного течения использовались методы скоростной рентгеновской радиографии. Для построения уравнения состояния использовались методы классической молекулярной динамики и статистической физики.

Положения, выносимые на защиту

По результатам работы сформулированы следующие положения, выносимые на защиту.

1. Методика скоростной рентгеновской томографии цилиндрически-симметричных 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 K 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).

Материалы диссертации представлены в следующих публикациях:

- работы с описанием экспериментальной станции и ее оборудования [14, 16, 18, 20, 31, 32, 34];
- работы с описанием методик и результатов исследований ударно-волновых течений [5, 26, 29];
- работы с описанием методик и результатов исследования инициирования детонации [1, 2, 15, 19, 23, 24, 30, 38];
- работы с описанием методик и результатов определения средней плотности детонационного течения [1–4, 8, 18, 22, 30, 38];
- работы с описанием методики и результатов томографии плотности [3, 6, 7, 12, 15, 17, 23, 24, 33];
- работы с описанием методики и результатов томография плотности, массовой скорости и давления представлена в публикациях [9, 13, 18, 22, 25, 28, 35];
- описание уравнения состояния реагирующих газов и результатов тестирования [37].

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.

Вклад автора и согласие основных соавторов об использовании совместно полученных результатов приведен в приложении Г.

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).

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 075-15-2020-781).

Дополнительно, 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.

Глава 1

Развитие пучковых методов исследования быстропротекающих процессов

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.

1.1 Применение СИ для исследования динамических процессов

Современные ускорители заряженных элементарных частиц позволяют генерировать пучки различной природы с уникальными характеристиками. В исследовательской практике используются ускорители протонов и ядер атомов, просвечивающие исследуемый объект непосредственно ускоренными частицами, и ускорители электронов – синхротроны, генерирующие рентгеновское излучение в поле поворотных магнитов или в специализированных вставных устройствах – вигглерах и ондуляторах. Последние получили значительно большее распространение для проведения научных исследований.

Одна из первых обзорных работ, описывающих свойства генерируемого ускорителем излучения и его прикладные возможности, представлена советскими учеными [42]. Современное состояние источников и методик описано в работах [43, 44].

С точки зрения потребителя, синхротрон является современной альтернативой рентгеновской трубке. Большая интенсивность излучения позволяет проводить рентгенографические и дифракционные исследования, значитель-

но сокращая время измерений, а качество пучка – реализовать новые методики, недоступные для рентгеновской трубки.

На современных ускорительных комплексах удается реализовать широкий спектр исследовательских методик: радиография абсорбционная и с фазовым контрастом; анализ наноструктур по рентгеновскому рассеянию; дифракционный анализ фазового состава и структуры атомной решетки материалов. Спектр исследуемых объектов также широк: материаловедение, химия, катализ, биология, фармацевтика, исследование технологических процессов. Активно развиваются методики с высоким временным разрешением для задач горения и взрыва.

Современный ускоритель электронов – это большая машина, в которой по сложной траектории двигаются сгустки (банчи) ускоренных электронов с энергией несколько ГэВ (рис. 1.1). В поле каждого поворотного устройства, при движении по искривленной траектории, электроны излучают рентгеновские фотоны в широком диапазоне энергий, фактически от видимого излучения до десятков кэВ.

Характерные значения релятивистского фактора $\gamma = 1/(1 - v^2/c^2)^{1/2}$, где v и c это скорость частицы и света соответственно, или $\gamma = E/mc^2$, если выражать его через кинетическую энергию E и массу покоя частицы m, для современных синхротронов составляет $10^3 \div 10^4$. В силу большого значения релятивистского фактора, излучение сосредоточено в узком углу (около одного милирадиана) по ходу движения электронов. В итоге ускоритель – это рентгеновский направленный стробоскоп с большой средней мощностью (1 – 10^3 Вт) и еще большей импульсной.

Несмотря на кажущуюся несовместимость тонких, прецизионных методик синхротронного излучения и агрессивность взрывных процессов, исследование быстропротекающих процессов является одной из немногих методик, востребовано потребляющих огромную импульсную мощность ускорителя. Современное исследовательское оборудование позволяет проводить измере-

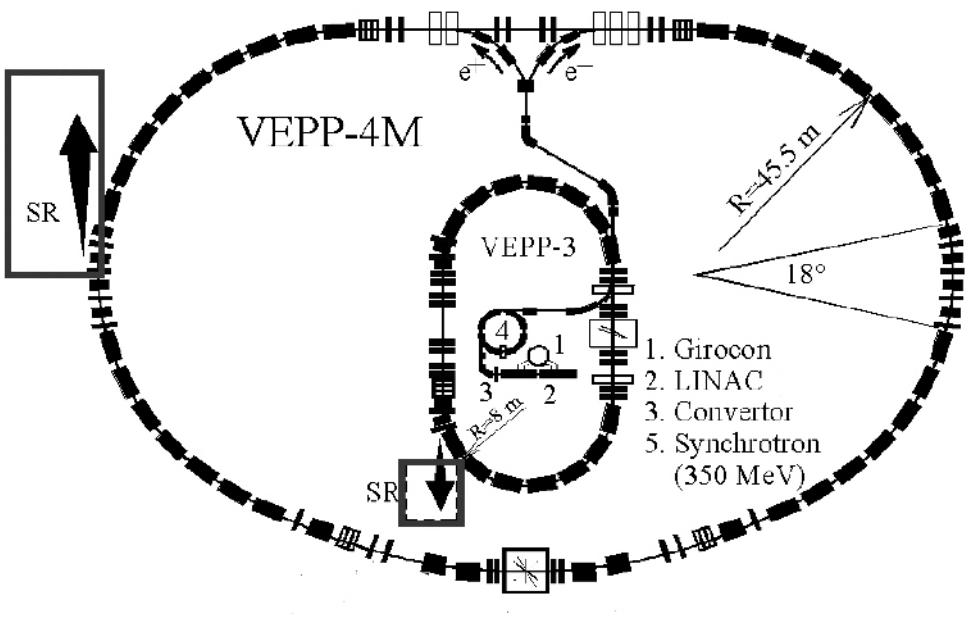


Рисунок 1.1 – Электрон-позитронный накопитель ВЭПП-3 ИЯФ СО РАН, г. Новосибирск [45].

ния, обрабатывая информацию от рентгеновской вспышки каждого банча. Высокое пространственное и временное разрешение, отсутствие влияния на исследуемое явление делают методики СИ исключительно перспективными для исследования агрессивных взрывных процессов.

Схема проведения взрывного эксперимента представлена на рисунке 1.2. 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.

1.2 Станция исследования динамических процессов на ускорительном комплексе ВЭПП-3

1.2.1 Немного истории

Работы по подготовке первых экспериментов по исследованию динамических процессов с использованием СИ начались в 1998 г. (рис. 1.3) [46]. Опре-

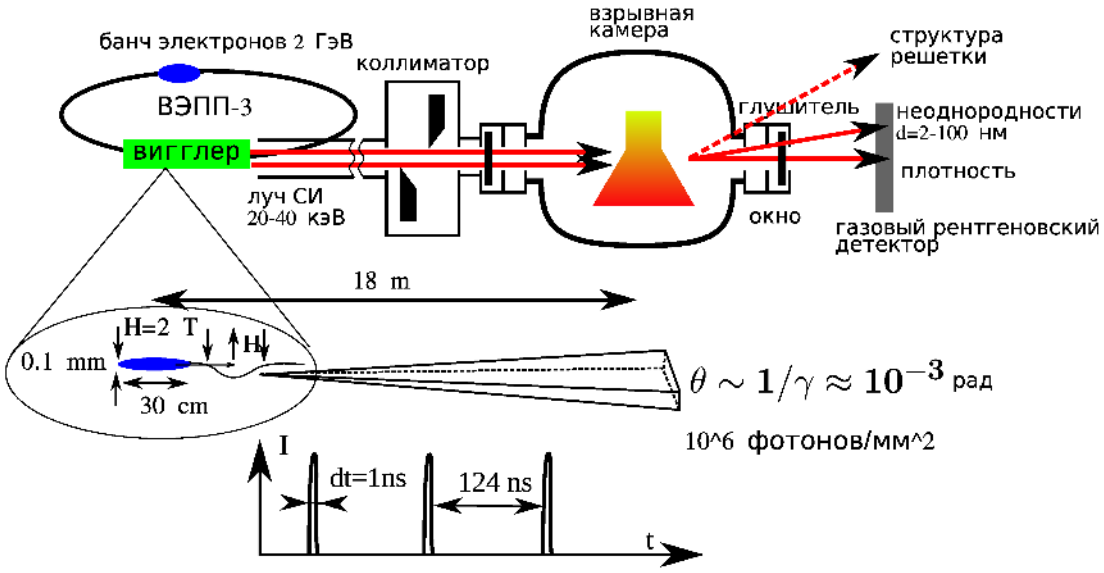


Рисунок 1.2 – Схема проведения рентгенографического эксперимента на ускорителе ВЭПП-3.

деляющий вклад в демонстрацию возможностей методики внесли сотрудники институтов СО РАН: Зубков Павел Иванович, Тен Константин Алексеевич, Толочко Борис Петрович, Кулипанов Геннадий Николаевич, Титов Владимир Михайлович. Без глубокого научного предчувствия и высочайшей квалификации экспериментаторов этой команды формирование нового научного направления тогда бы не состоялось.

При планировании первых экспериментов сразу были сформулированы три направления исследований: скоростная абсорбционная рентгенография, малоугловое рентгеновское рассеяние и дифракция в большие углы. Первые две методики быстро показали эффективность и продолжают развиваться как на станциях ИЯФ, так и в других исследовательских центрах. Россия здесь является признанным первопроходцем.

Задачу проведения дифракционных исследований с высоким временным разрешением на оборудовании ИЯФ тогда решить не удалось. Для проведения взрывных исследований требуется короткая экспозиция и, соответственно, высокая интенсивность излучения. Поэтому для задач рентгенографирования и рассеяния использовался белый не монохроматический рентгеновский пучок. И даже в этих условиях, точность измерений в основном огра-

ничивалась статистикой фотонов.

При реализации традиционной экспериментальной методики дифракционных измерений используются монохроматоры рентгеновского излучения. При этом поток фотонов уменьшается на два – три порядка, и выйти на приемлемое временное разрешение для исследования взрывных процессов не удается. Эта задача была решена с использованием современного специализированного источника рентгеновских фотонов в Аргонской лаборатории в 2009 г. [47].

В итоге, на оборудовании канала на ВЭПП3 впервые в мире были применены методики скоростной рентгенографии и малоуглового рентгеновского рассеяния для исследования быстропротекающих процессов. За более чем 20 лет истории исследован широкого круг явлений: стационарная детонация и инициирования; распространение ударных волн и поведение элементов конструкций в условиях ударного воздействия [39].

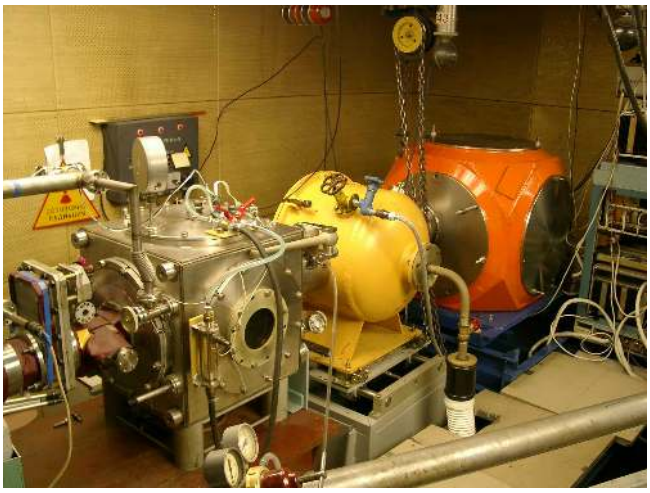
С учетом накапливаемого опыта станция дважды перестраивалась: в 2000 г. (рис. 1.4, а) и в 2019 г. (рис. 1.4, б). Последняя реконструкция была проведена непосредственно под моим руководством.

1.2.2 Параметры станции на ВЭПП3

Экспериментальная станция на ВЭПП3 оптимизирована для проведения скоростных исследований течений с небольшой рентгеновской плотностью. Для материалов. не содержащих в своем составе химических элементов с большим порядковым номером, это соответствует диапазону от 0.1 до 5 г/см^2. Описание экспериментальной станции и ее оборудования представлено в публикациях [14, 20, 31, 32, 34, 48].

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 (рис. 1.5). Это хорошо подходит для исследования относительно тонких зарядов взрывчатого вещества диаметром до 2 см.

Рисунок 1.3 – Взрывная камера (15 грамм ВВ) на 5-ом канале ВЭПП-3 (17 ноября 1999 г.). В настоящее время станция демонтирована и не эксплуатируется.



а)

б)

Рисунок 1.4 – Фотографии бункера СИ ВЭПП-3 и характеристики станций.
а – (2000 г.) взрывная камера на 20 г, время между кадрами 496 нс, 32 щелевых кадра с пространственным разрешением 0.1 мм. $E_{ef} = 20$ кэВ. На данный момент станция демонтирована и не эксплуатируется.
б – (2019 г.) взрывная камера на 50 г., время между кадрами 124 нс, 100 щелевых кадров с пространственным разрешением 0.1 мм. $E_{ef} = 20$ кэВ. Станция эксплуатируется по настоящее время.

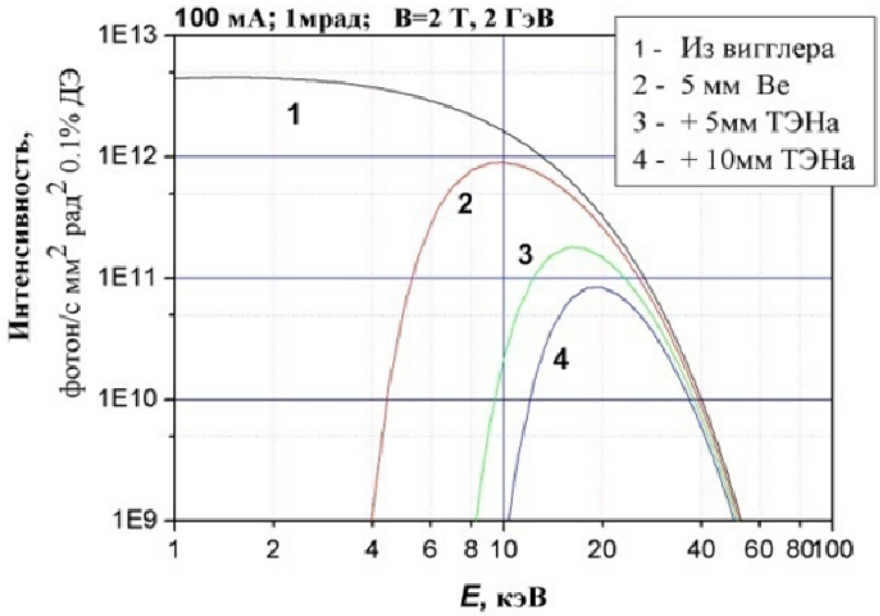


Рисунок 1.5 – Спектр излучения с учетом ослабления окон и образца.

На расстоянии около 18 метров от источника на исследуемом образце 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 (рис. 1.6). 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 [14, 20, 31, 34, 49].

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.

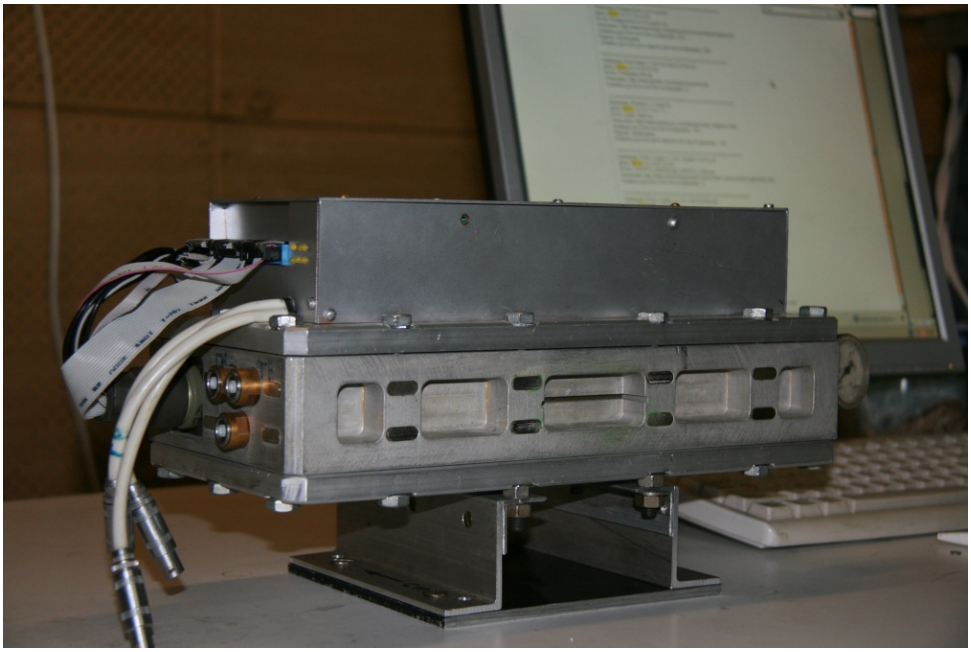


Рисунок 1.6 – Внешний вид рентгеновского детектора DIMEX.

1.3 Тенденции развития пучковых методов исследований с высоким временным разрешением

1.3.1 Станции-аналоги

Благодаря перспективе увеличения пространственного и временного разрешения, пучковые методы диагностики быстропротекающих процессов получили широкое распространение для исследования быстропротекающих процессов. Создание современной станции требует значительных временных и финансовых ресурсов, а для получения новых интересных научных результатов необходима коллаборция нескольких организаций. Эта область из инновационной уже становится конкурентной. Для эффективного использования имеющихся возможностей ускорителя и для понимания направления научного развития необходимо учитывать технические возможность и научные достижения других лабораторий. Приведу анализ современных исследовательских направлений.

Первые результаты были получены на ускорителе протонов в ядерном центре США (Los Alamos National Laboratory). В первой открытой публика-

Рисунок 1.7 Исследовательские центры, развивающие пучковые методы диагностики быстропротекающих процессов.

ции 1999 года были представлены результаты протонографии детонационных и ударно-волновых течений [50]. Для этого использовался 800 МэВ ускоритель. Несомненным преимуществом этой методики является высокая проникающая способность протонов, что позволяет исследовать взрыв больших зарядов и ударные течения тяжелых металлов. По сравнению с синхротроном, ускоритель протонов значительно сложнее и дороже, он менее распространен и пока не применяется для широкого круга экспериментальных методов и объектов исследований. На данный момент он остается инструментом специализированных исследований ядерных центров России и США.

Более широкое распространение получили методики с использованием синхротронного излучения (рис. 1.7). Основная причина – большое количество разнообразных методик, применяемых для широкого круга объектов исследований. Постройку и эксплуатацию дорогой сложной машины проще обосновать: есть много потребителей с научными задачами, в лице больших коммерческих компаний есть заказчики технологических исследований.

При анализе направлений динамических исследований на современных источниках синхротронного излучения видна яркая особенность – в качестве источника ударного воздействия используются в основном не конденсированные взрывчатые вещества, а пневматические пушки и генерация ударных волн импульсным лазерным излучением. У этих направлений есть своя перспектива.

Кроме нашей группы, только одна станция ускорительного комплекса APS проводит исследования с зарядами взрывчатых веществ. В открытых

Рисунок 1.8 – Станция протонной радиографии динамических процессов. США, Лос-Аламос [52].

публикациях приводится описание взрывной камеры, позволяющей проводить взрывы с массой до 5 грамм. Разработанное в рамках данной работы оборудование позволяет проводить рентгенографические эксперименты при взрыве заряда с массой до 50 грамм. Это мировой рекорд.

Приведем список центров, развивающих пучковые методы диагностики быстропротекающих процессов с описанием основных направлений исследований.

Лос-Аламосская национальная лаборатория (США). Сотрудники лаборатории впервые в мире (1999 г.) применили протоны с высокой энергий для импульсной радиографии [50–52]. Для исследований используется ускоритель протонов с энергией 800 МэВ. Разработанная методика многокадровой 2d протонной радиографии используется для исследования детонации и поведения материалов в условиях динамического нагружения (рис. 1.8).

Институт физики высоких энергий (Россия). Команда исследователей развивает методику скоростной протонной радиографии на базе ускорителя протонов на энергию 70 ГэВ (рис. 1.9). Установка рассчитана на энергию 50 ГэВ с полем обзора 60 мм. Установка позволяет получать изображения объектов с оптической толщиной свыше 300 г/см^2. Оптическое разрешение установки составляет 0.25 мм. Имеется многокадровая система регистрации

Рисунок 1.9 – Станция протонной радиографии динамических процессов. Россия, г. Протвино [53].

быстропротекающих процессов. При проведении динамических экспериментов используются малогабаритные взрывозащитные камеры нескольких типов, локализующие энерговыделение до 2.5 кг в тротиловом эквиваленте. На установке проводятся исследования детонационных свойств энергетических материалов и ударно-волновых свойств конструкционных материалов [53, 54]. По своим техническим возможностям установка является абсолютным мировым рекордом.

ВЭПП-3. Россия, г. Новосибирск. Параметры синхротрона: энергия электронов 2 ГэВ, периметр 74.39 м, ток 100 мА, 2 банча, время между банчами 124 нс, заряд в банче 10 нКулон, эмиттанс горизонтальный 292 нм·радиан.

Аргоннская национальная лаборатория. США, г. Чикаго. Параметры синхротрона: энергия электронов 7 ГэВ, периметр 1104 м, ток 100 мА, 324 банча, время между банчами 11 нс, заряд в банче 1.1 нКулон, эмиттанс: горизонтальный 3 нм·радиан, вертикальный 8 пм·радиан.

Активно развивающийся специализированный центр динамических исследований (рис. 1.10), первые публикации появились в 2015 г. Для генерации синхротронного излучения используются два сменных ондулятора, диапазон

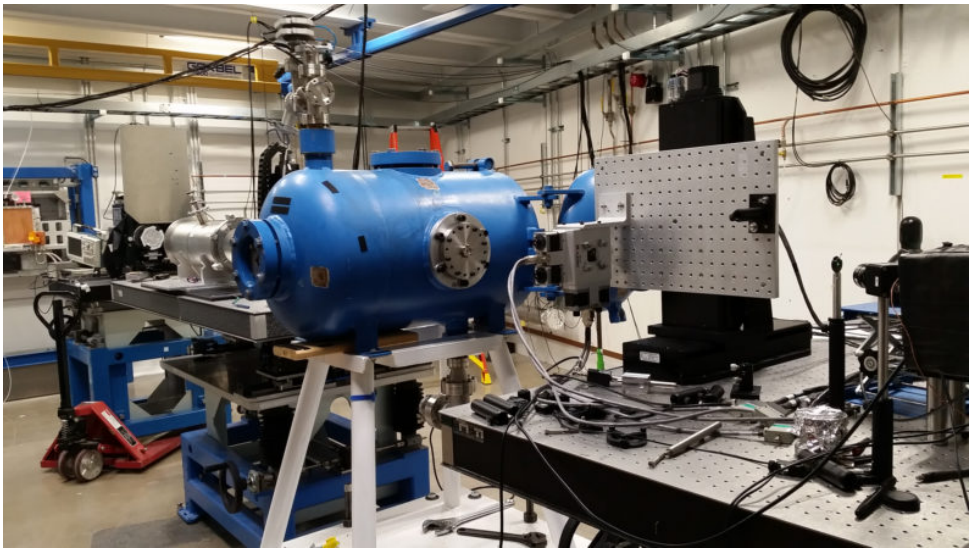


Рисунок 1.10 – США, Аргоннская национальная лаборатория, сектор динамических исследований (Advanced Photon Source, Dynamic Compression Sector https://dcs-aps.wsu.edu/).

энергии излучения 7–40 кэВ. Развивается широкий круг методик: рентгенография (абсорбционная [55] и фазоконтрастная [56]), малоугловое рентгеновское рассеяние [57] и дифракция [47, 58, 59].

Имеется взрывная камера на 15 г для исследования детонации энергетических материалов и пневматическая пушка для исследования поведения материалов в условиях динамического нагружения [60]. Аргоннская национальная лаборатория и ИЯФ СО РАН – это единственные места, где исследуются детонационные течения методами синхротронного излучения.

Дополнительно развивается направление исследования мощных ударных волн, генерируемых импульсным лазерным излучением [61]. Это отдельная область динамических процессов с плотностью энергии превышающей возможности конденсированные энергетических материалов.

Без сомнений, по широте реализованных методик и по потенциальным возможностям центр динамических исследований на базе Аргоннской лаборатории является самым современным в мире.

Европейский центр синхротронных исследований. Франция, г. Гренобль, Европейский центр синхротронных исследований (ESRF-EBS). Пара-

метры синхротрона: энергия электронов 6 ГэВ, периметр 844 м, ток 200 мА, 992 банча, время между банчами 2.8 нс, заряд в банче 0.57 нКулон, эмиттанс: горизонтальный 0.130 нм·радиан (3.8 нм·радиан до реконструкции), вертикальный 8 пм·радиан.

ID19 — это канал жесткого рентгеновского излучения, в основном предназначенный для (in situ) микротомографии и высокоскоростной радиографии с интенсивным использованием рентгеновского фазового контраста. Эти методы применяются в самых разных областях, таких как исследование материалов, палеонтология и промышленность. Высокий уровень универсальности канала луча позволяет адаптировать его к широкому спектру экспериментальных исследований in situ при нагреве в печи, при воздействии ударными волнами, генерируемыми газовой пушкой и лазерным излучением [62–64].

ID09 – канал дифракционных измерений с высоким временным разрешением. Используется для изучения сверхбыстрых структурных изменений в конденсированных средах [65].

ID24 – канал для исследования тонкой структуры спектров поглощения рентгеновских лучей (EXAFS) с высоким временным разрешением [66].

Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах. Германия, г. Гамбург, Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах (XFEL) [67–69].

Научными приложениями являются исследования вещества внутри экзопланет, новых фаз экстремального давления и плазмы твердотельной плотности, а также структурных фазовых переходов сложных твердых тел в сильных магнитных полях. Первый пользовательский эксперимент состоялся в мае 2019 года.

Использование в качестве источника излучения лазера на свободных электронах позволяет генерировать мягкие пучки излучения рекордной мощности. Эта станция имеет исключительный потенциал для проведения дифракционных измерений в ударных волнах, генерируемых лазерным излучением.

Характерные характеристики явления это 1 мм и 1 нс.

Для исследования относительно толстых объектов, характерных для детонации энергетических материалов, эта станция мало подходит.

Diamond light source. Параметры синхротрона: энергия электронов 3 ГэВ, периметр 565 м, ток 300 мА, 936 банчей, время между банчами 2.1 нс, заряд в банче 0.6 нКулон, эмиттанс: горизонтальный 3 нм·радиан, вертикальный 8 пм·радиан.

ID12-JEEP – канал для исследования технологических процессов. В качестве источника излучения используется сверхпроводящий вигглер с полем 4.2 Т. Станция спроектирована для проведения дифракционных и рентгенографических измерений, в том числе с высоким временным разрешением [70]. Пока идет строительство и хороших публикаций нет.

СКИФ. Коллаборацией институтов Сибирского отделения Российской академии наук ведется проектирование станций и начато строительство специализированного источника синхротронного излучения. Характеристики запланированного ускорителя и магнитной системы представлены в работе [71]. Ожидаемые параметры синхротрона: энергия электронов 3 ГэВ, периметр 476 м, ток 300 мА, 300 банчей, время между банчами 5 нс, заряд в банче 1.5 нКулон, эмиттанс горизонтальный 0.07 нм·радиан.

На одной из станций первой очереди – "Быстропротекающие процессы" запланировано развитие методик исследования быстропротекающих процессов [**skif_rubtsov_2022**, 72].

1.3.2 Конкурентные научные ниши

Анализ приведенных выше мировых центров по исследованию быстропротекающих процессов показывает, 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. Сводка параметров, методик и объектов исследований приведена в таблице 1.1.

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.

1.4 Рентгенография детонационного течения

1.4.1 Общие характеристики рентгенографического эксперимента

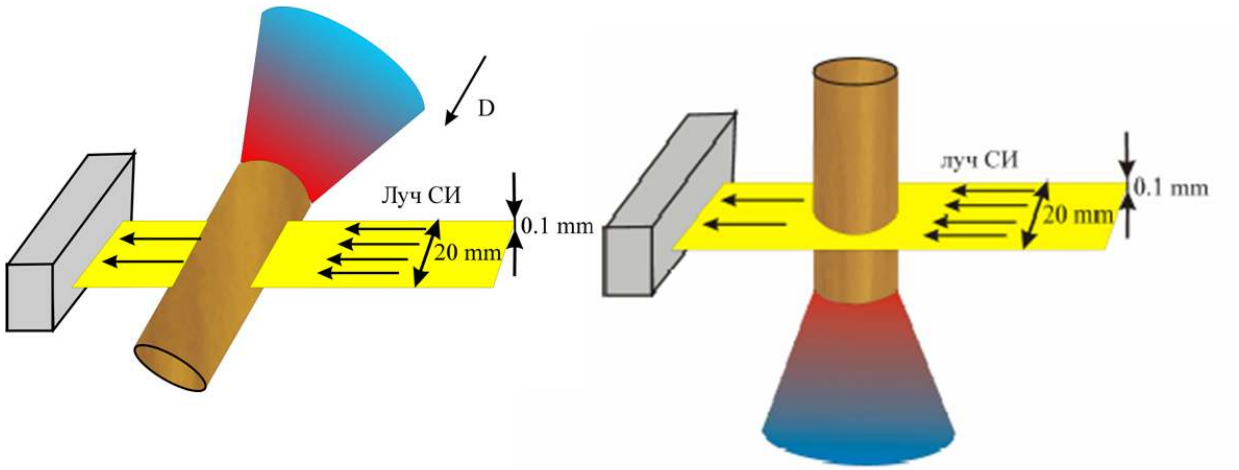
Для исследования детонационного течения использовались две постановки рентгенографического эксперимента. В первой, продольной, исследуемый заряд зондировался вдоль оси (1.11, а). В этой постановке определялась динамика рентгеновской тени вдоль оси заряда. Простая в анализе, эта постановка позволяет определять 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. 1.11, 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.

При проведении эксперимента рентгеновский детектор находится в режи-

Центры, исследующие быстропротекающие процессы пучками СИ и протонов	Вставное устройство	Объекты исследования		Методики			
		Динамическая прочность материалов, разрушение конструкций. 0.1-1 ГПа	Энергетические материалы, взрывные процессы 10-30 ГПа	Ударные волны (пушки) 1-50 ГПа	Ударные волны (лазеры) 50-500 ГПа	Рентгенография (imaging)	Малоугловое рентгеновское рассеяние (SAXS)	Дифракция (XRD)
США, Los Alamos National Laboratory, Ускоритель протонов 0.8 ГэВ, 1999 г.	Протоны 0.8 ГэВ		100 г. ВВ			2d, dt 100 нс, dx 0.2 мм, L 100x100 мм^2		
Россия, Протвино и Саров, Ускоритель протонов У70, раньше 2009 г.	Протоны 70 ГэВ		1000 г. ВВ			2d, dt 100 нс, dx 0.2 мм, L 60x60 мм^2		
Россия, Новосибирск, ИЯФ, ВЭПП3, 2000 г.	Виглер, 20 кэВ		50 г. ВВ			1d, dt 124 нс, dx 0.1 мм, L 40 мм	124 нс	-
США, Аргонская лаборатория, APS, The Dynamic Compression Sector, 2009 г.	Ондулятор 10, 20 кэВ		3 г.	U 1 км/с, d 12 мм	100 Дж, 1012 Вт/см^2, 0.25-1 мм, 300 ГПа	2d, 500 нс, 10x10 мм^2.	2d, 10-100 нс	2d, dt 10-100 нс
Россия, Новосибирск, ИЯФ, ВЭПП4, 2013 г.	Виглер 40 кэВ		250 г. ВВ	U 0.5 км/с, d 20 мм		1d: 624 (150) нс, 0.1 мм. 2d: 624 нс, 0.1 мм	624 нс.	100 мкс
Германия, Гамбург, XFELL, 2018 г.	Ондулятор, 8, 24 кэВ				100 Дж, 10 нс	Фазоконтрастное изображение (PCI).		
Франция, Гренобль, ESRF, каналы ID24, ID19, ID09, 2018 г.	Ондулятор + виглер			U 0.5 км/с, d 12 мм	Лазер пока строят. Аналог (XFEL)	Радиография просвечивающая и фазоконтрастная, рассеяние, дифракция, спектроскопия.		
Англия, Diamond Light Source, канал I12, 2014 г.	Виглер, 50 - 150 кэВ	Прочность нагруженных конструкций (авиадвигатели)		U 0.5 км/с, d 12 мм (привозили из Англии)		2d, 1 мкс, L 5x5 мм^2		
Россия, СКИФ, 2024 г.	Виглер, 30 - 70 кэВ		200 г., 2000 г. ВВ	U 1 км/с, d 30 мм		0d 1 нс (стрик камера), 1d 50 нс, 2d 10 – 100 нс		1d; 2d: dt 50 нс

Таблица 1.1 – Исследовательские центры, развивающие пучковые методы диагностики быстропротекающих процессов. Цветом выделены методики рентгенографии, представленные в данной работе.



а) б)

Рисунок 1.11 – Схема расположения исследуемого заряда в рентгенографическом эксперименте: а – продольные измерения для определения скорости детонационной волны или структуры нестационарного течения; б – поперечные измерения для определения внутренней структуры течения.

ме постоянной записи сигнала от каждого банча во все пространственные каналы детектора. По сигналу от контактного датчика, установленного во взрывной линзе, с соответствующей задержкой F_n производится остановка записи и сохраняется 100 временных кадров (рис. 1.12).

После замыкания контактного датчика, детектор дожидается следующего сигнала синхроимпульса фазы ускорителя (рис. 1.12, черные длинные вертикальные метки) и генерирует импульс начала отсчета времени. Отсчет времени начинается от первого отрицательного фронта синхроимпульса детектора и необходим для формирования общей шкалы времени для дополнительных экспериментальных методик, используемых в эксперименте.

При нумерации кадров детектора от нуля (0, 1, ... 98, 99), момент записи i-го кадра в микросекундах определяется по формуле

$$t = (F_n - 100 + i)0.124 + \delta,$$

где F_n задаваемое в эксперименте целое число кадров задержки, δ неизвест-

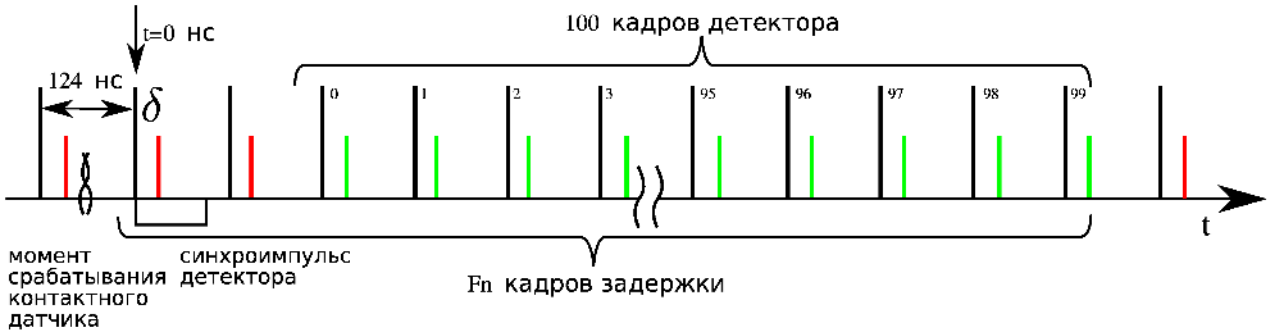


Рисунок 1.12 – Схема, поясняющая систему запуска и задержек в детекторе DIMEX: черные длинные вертикальные метки – синхроимпульсы от ВЭПП-3; цветные короткие вертикальные метки – моменты прохождения рентгеновского излучения через исследуемый объект (зеленые записаны, красные пропущены).

пая фаза задержки между синхроимпульсами ВЭПП-3 и моментами просвечивания исследуемого объекта рентгеновскими фотонами. На δ есть ограничение – $0 < \delta < 124$ нс. При обработке данных принималось $\delta = 0$ нс.

Таким образом, во всех экспериментах время отсчитывается от первого импульса детектора DIMEX, который генерируется с небольшой задержкой от момента срабатывания контактного датчика во взрывной линзе, инициирующей заряд.

1.4.2 Калибровка и восстановление массы на луче

Для восстановления массы на луче ($\int \rho dl$) проводилась калибровка 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) (рис. 1.13). При обработке динамического эксперимента эта зависимость обращалась – из значений интенсивности детектора определялось количество массы на пучке (рис. 1.14).

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

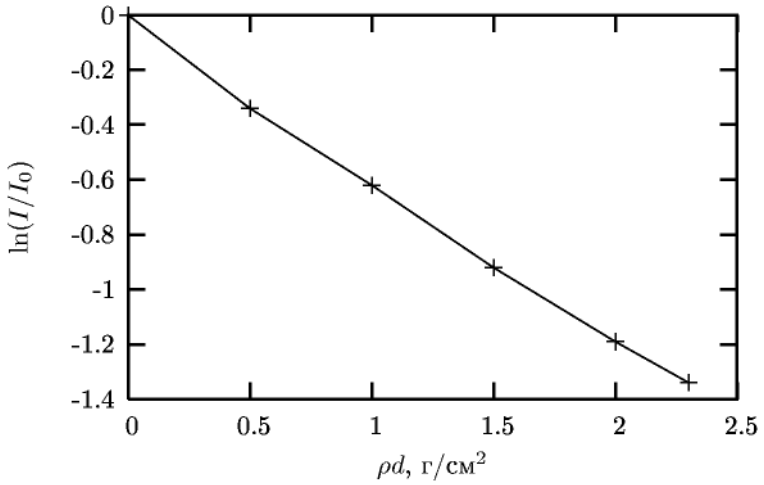


Рисунок 1.13 – Зависимость ослабления интенсивности излучения от количества просвеченного вещества тротила.

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

Просвечиваемые толщины приведены для органических материалов, состоящих из элементов C, H, N и O. При исследовании составов с более тяжелыми добавками (Mg, Al), наилучшим условиям измерений соответствуют меньшие значения толщин исследуемых объектов.

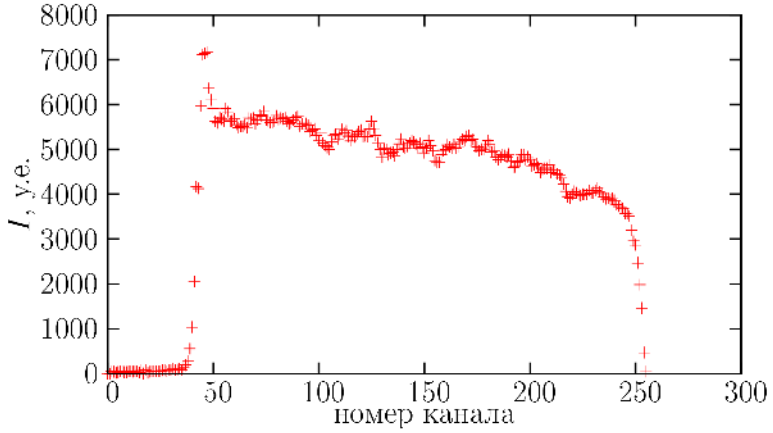
Достигнутые характеристики детектора вполне приемлемы для проведения количественных измерений детонационных процессов.

1.4.3 Пример результатов продольных измерений

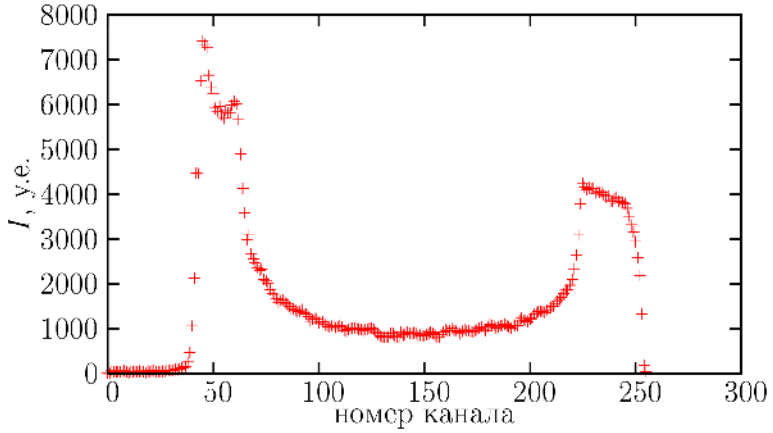
Для определения динамики средней плотности вдоль оси заряда и скорости детонационной волны проводились продольные рентгенографические эксперименты. Схема проведения экспериментов показана на рисунке 1.15.

Результаты исследования в продольной постановке детонационного течения заряда на основе октогена приведены на рисунке 1.16.

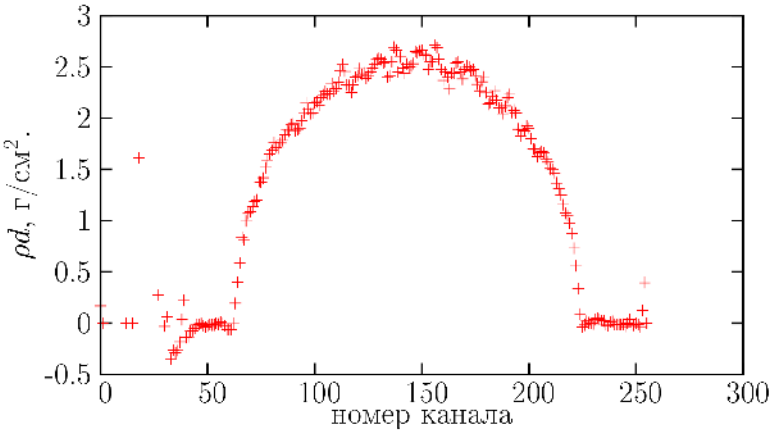
Полученные данные позволяют определить положение фронта (рис. 1.17)



Чистый пучок без образца.



Пучок, затененный однородным цилиндром.



Восстановленное с помощью калибровки количество вещества на луче.

Рисунок 1.14 – Схема калибровки данных детектора.

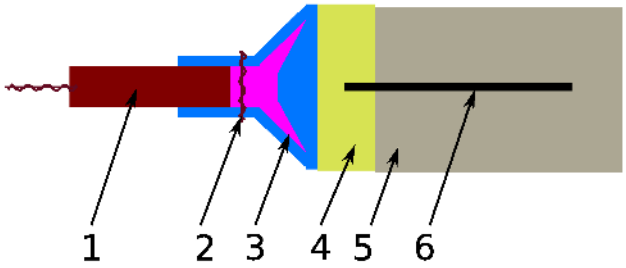
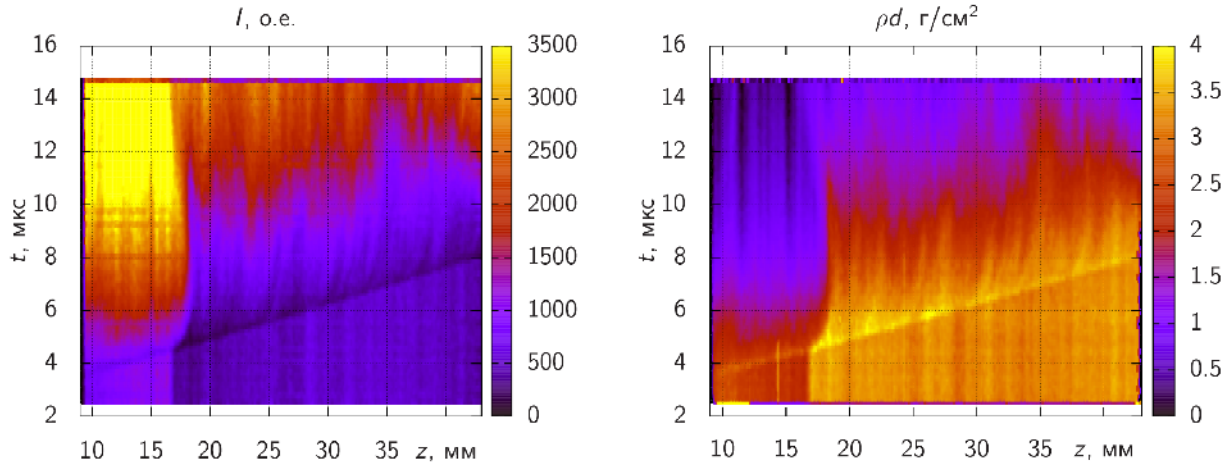


Рисунок 1.15 – Схема проведения экспериментов по измерению распределения плотности вдоль оси при детонации заряда ВВ. 1 – электродетонатор, 2 – электроконтактный датчик, 3 – генератор плоской волны, 4 – инициирующий заряд, 5 – исследуемый заряд, 6 – синхротронное излучение.



а) б)

Рисунок 1.16 – Динамика распределения рентгеновской тени вдоль оси заряда из смеси октогена с алюминием: а – интенсивность ослабленного излучения, б – масса на луче (ρd, г/см^2).

и скорость (рис. 1.18) для каждого момента измерений.

Способ измерения скорости основан на определении необходимого смещения вдоль оси z экспериментальных профилей массы на луче излучения, полученных в различных кадрах детектора, для их наилучшего совмещения друг с другом. Деление полученного смещения на время между соответствующими кадрами даст среднюю скорость на выбранном промежутке времени. Точность определения этого смещения в каналах детектора зависит от скорости детонационного фронта и экспериментального шума. В силу наличия существенного шума, обусловленного высокой долей непрозрачных металлических добавок в заряды, это смещение определяется с точностью до 1–2

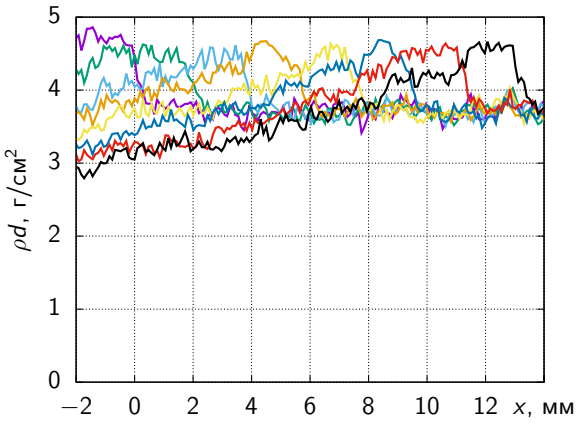


Рисунок 1.17 – Распределения массы на луче с шагом 0.248 мкс для заряда ТАТБ диаметром 20 мм.

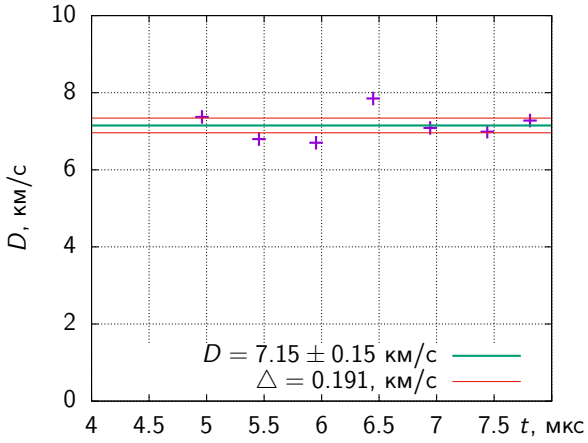


Рисунок 1.18 – Зависимость скорости детонационного фронта от времени для заряда смеси октогена с алюминием диаметром 20 мм.

канала и хуже в случаях неоднородных зарядов и нестабильной формы детонационного фронта. Измеряемая таким способом средняя скорость на диапазоне времени 0.124 мкс между соседними кадрами будет иметь очень высокую ошибку, не связанную с явлением. Если значительно увеличить интервал измерения средней скорости, то мы получим лишь среднюю скорость, упустив из вида возможные особенности распространения детонации в зарядах. Приведенные на рисунке 1.18 данные по мгновенным скоростям соответствуют средним скоростям на интервале времени 0.496 мкс. Ошибка измерения скорости обозначена за Δ, а для средней скорости по всей области наблюдения приведена стандартная ошибка среднего.

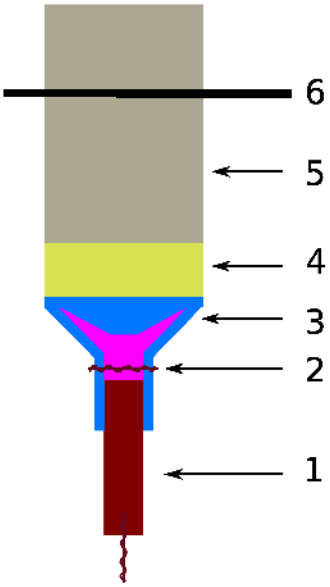


Рисунок 1.19 – Схема проведения экспериментов по измерению распределения плотности поперек оси при детонации заряда ВВ. 1 – электродетонатор, 2 – электроконтактный датчик, 3 – генератор плоской волны, 4 – инициирующий заряд, 5 – исследуемый заряд, 6 – синхротронное излучение.

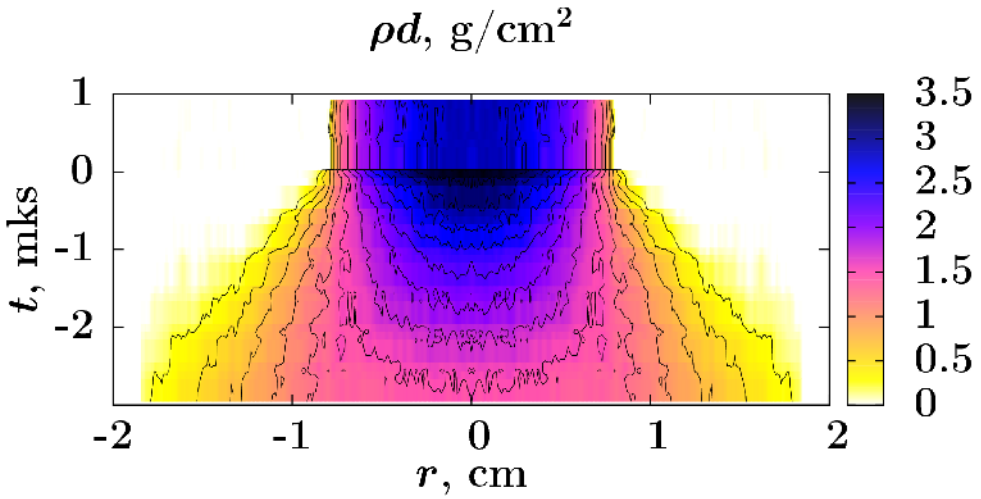


Рисунок 1.20 – Рентгеновская тень (ρd, г/см^2) при детонации заряда ТНТ50% гексоген50%.

1.4.4 Пример результатов поперечных измерений

Для проведения исследования в поперечной постановке использовалась схема эксперимента, представленная на рисунке 1.19.

Результаты исследования детонационного течения заряда на основе октогена в поперечной постановке приведены на рисунке 1.20.

Следует обратить внимание, что ни продольные, ни поперечные измере-

ния без дополнительной обработки не фиксируют область повышенной плотности в зоне химической реакции и основного энерговыделения. Причина этого – неплоскостность фронта детонационной волны. При соблюдении качества сборки в поперечных экспериментах наблюдается симметричный искривленный фронт. При исследовании неоднородных зарядов наблюдается несимметричный, перекошенный, искривленный фронт. По этой причине разрешение методики снижается до пространственной протяженности фронта вдоль оси заряда. Это всегда больше зоны энерговыделения.

Как будет показано далее, корректный учет формы фронта при анализе рентгеновской тени для составов с протяженной зоной энерговыделения позволяет определить время химической реакции.

1.5 Заключение

Экспериментальные станции по исследованию динамических процессов методами синхротронного излучения активно развиваются. Появляются новые экспериментальные методики, расширяется список исследуемых объектов, формируются высококвалифицированные коллективы исследователей, видна как поддержка государства, так и бизнеса. Эта область стремительно развивается и стала конкурентной.

Яркими научным направлением в области относительно небольших давлений является исследование ударного воздействия пневматическими пушками, для исследования больших плотностей энергии используется генерация ударных волн импульсным лазерным излучением. Это специализированные дорогостоящие установки. Для их создания и эффективной эксплуатации требуется коллаборация нескольких организаций.

Модернизированная в рамках работы экспериментальная станция на ВЭПП-3 ИЯФ СО РАН для исследования детонационных процессов, безусловно, соответствует мировому уровню, а по масштабам исследуемых зарядов является мировым рекордом. Станция позволяет решать как фундаментальные научные проблемы физики взрыва, так и технологические задачи,

связанные с безопасностью и эффективностью использования взрывчатых материалов.

Разработанная методика проведения динамического рентгенографического эксперимента и обработки данных позволяет получить количественные характеристики массы на луче в детонационном течение. По представленной методике проведено исследование широкого спектра энергетических материалов.

Основные материалы с описанием экспериментальной станции и ее оборудования представлены в публикациях [14, 18, 20, 31, 32, 34].

Глава 2

Восстановление газодинамических параметров течения

В главе приводится описание нескольких методик обработки данных рентгенографического эксперимента: восстановление плотности, газодинамических параметров детонационного течения и уравнения состояния продуктов взрыва. Для широкого круга взрывчатых составов определены значения параметров детонации Чепмена-Жуге.

2.1 Восстановление распределения плотности

2.1.1 Восстановление плотности объекта по одному сечению

Современные методы томографии позволяют с большой точностью определять внутреннее распределение плотности даже в сложных объектах [27]. 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 [73, 74]. 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 (рис. 2.1) относительного неизвестного распределения плотности $\rho(r)$ по известной тени $F(x)$:

$$F(x) = \int_x^{R_0} \frac{2r}{\sqrt{r^2 - x^2}} \rho(r) dr. \tag{2.1}$$

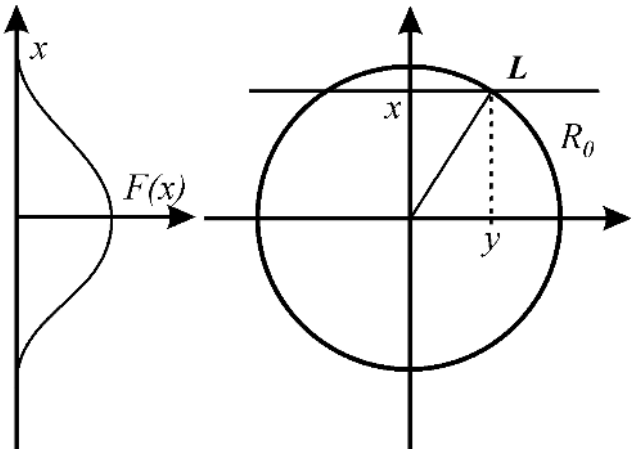


Рисунок 2.1 – Постановка задачи томографии.

Было опробовано несколько способов обращения 2.1. При тестировании на модельной $F(x)$, вычисленной по заданной плотности без дополнительных ошибок, получаются превосходные результаты. Но, при искусственном добавлении даже небольшого шума, качество обращения катастрофически падает.

Это известная проблема, и многими отмечалось ранее [74, 75], что уравнение 2.1 при восстановлении плотности приводит к большим ошибкам даже при хорошей точности в определении $F(x)$. В работе [74] проводится анализ возможных методов решений, а также рекомендации по увеличению и контролю точности. Но в общем проблема остается – это неискоренимая особенность рассматриваемого уравнения. При выборе конкретного алгоритма восстановления распределения плотности важнейшим фактором является устойчивость к ошибке в измеренной тени.

В качестве простого алгоритма восстановления плотности, дающего удовлетворительную точность, в работе было использовано соотношение из [76]

$$\rho(r) = -\frac{1}{\pi r}\frac{d}{dr}\int_r^{R_0}\frac{xF(x)}{\sqrt{x^2-r^2}}dx. \tag{2.2}$$

При вычислении интеграла в правой части соотношения 2.2, $F(x)$ задавалась в виде кубического сглаживающего сплайна [77], проведенного через экспериментальные точки. Параметр степени сглаживания подбирался

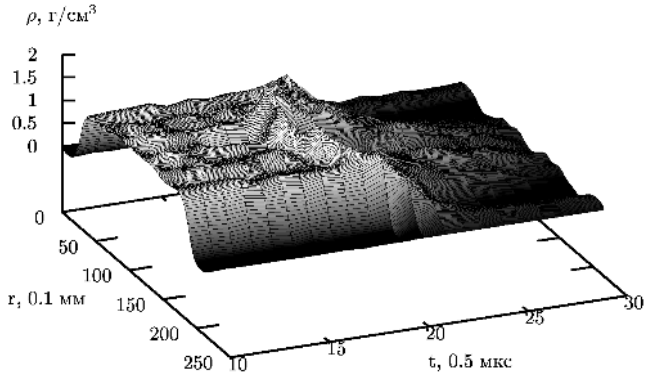


Рисунок 2.2 – Зависимость плотности от радиуса и времени при инициировании заряда пористого тэна потоком горячих газов в сечении 6 мм от инициируемого торца.

из условий разумного соотношения точности и пространственного разрешения.

Результаты восстановления распределения плотности в детонационном течении представлены на рисунке 2.2. На распределении плотности хорошо видно исходную структуру заряда перед взрывом, хорошо различим искривленный фронт формирующейся детонационной волны. 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 тень от всего объекта.

Рассмотренный метод прост, не требует априорной информации о внутренней структуре объекта, но устойчивость к шумам почти всегда неудовлетворительная. Дальнейшего развития в работе подход не получил, но имеет историческое значение – с его помощью были получены первые распределения плотности детонационного течения и показана перспективность дальнейших исследований.

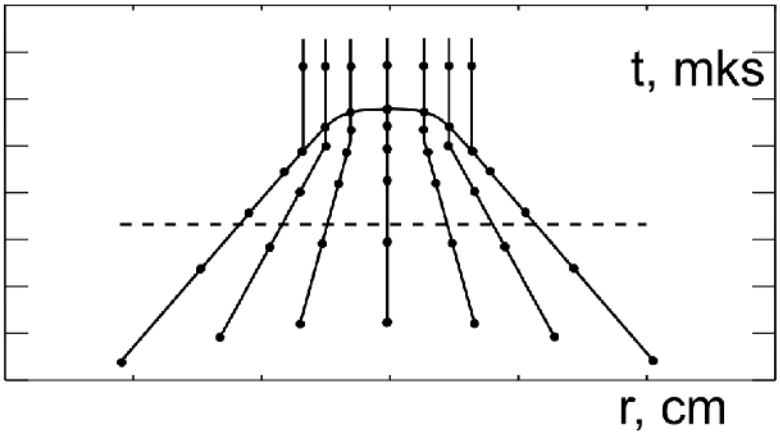


Рисунок 2.3 – Структура сетки и узлов для корректного описания распределения плотности.

2.1.2 Восстановление плотности объекта по нескольким временным сечениям

Описание метода

Используя опыт метода восстановления плотности по инверсии Абеля, описанный выше, были сформулированы основные положения для совершенствования методики: экспериментальных данных много, исследуемое течение не очень сложное, можно использовать сглаживание, 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 аппроксимация зависимости плотности от радиуса и от времени в исследуемом сечении. Для этого в координатах (r, t) строилась сетка (рис. 2.3). 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; и 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 требуемый момент времени (пунктирная прямая на рисунке 2.3), 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 постановке алгоритм формулируется следующим образом. Строится функция $Error$ суммы квадратов отклонений экспериментальной и тестируемой теней по всем экспериментальным точкам по радиусу и по времени, зависящая от ρ_i и параметров сетки –

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

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

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.

Распределение плотности при детонации цилиндрических зарядов

На рисунках 2.4 и 2.5 представлены соответственно измеренная в эксперименте тень и восстановленное распределение плотности.

Несмотря на понятные технические сложности, возникающие при реализации численного алгоритма, метод устойчиво работает. По сравнению с инверсией Абеля, он значительно устойчивее к ошибке. Кроме того, он позво-

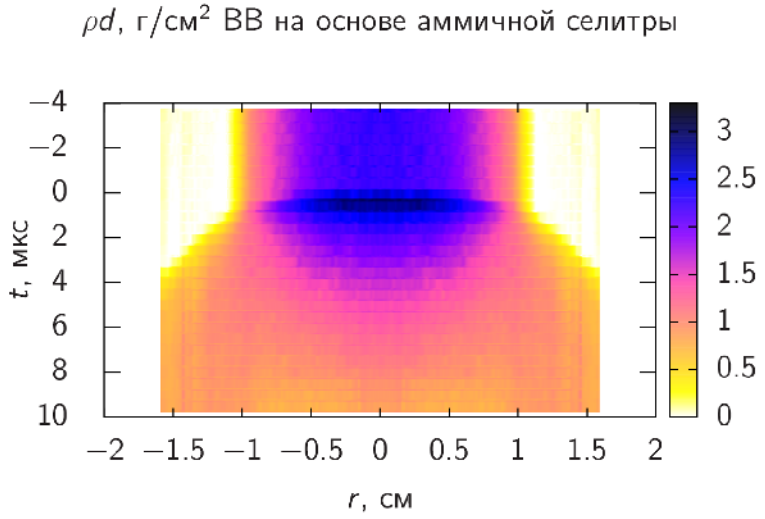


Рисунок 2.4 – Тень от течения при детонации цилиндрического заряда эмульсионного взрывчатого вещества на основе аммиачной селитры.

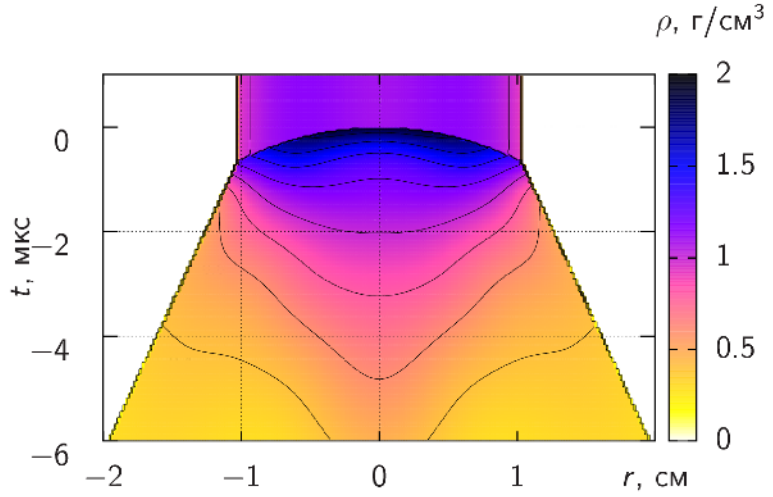


Рисунок 2.5 – Восстановленное распределение плотности при детонации цилиндрического заряда эмульсионного взрывчатого вещества на основе аммиачной селитры.

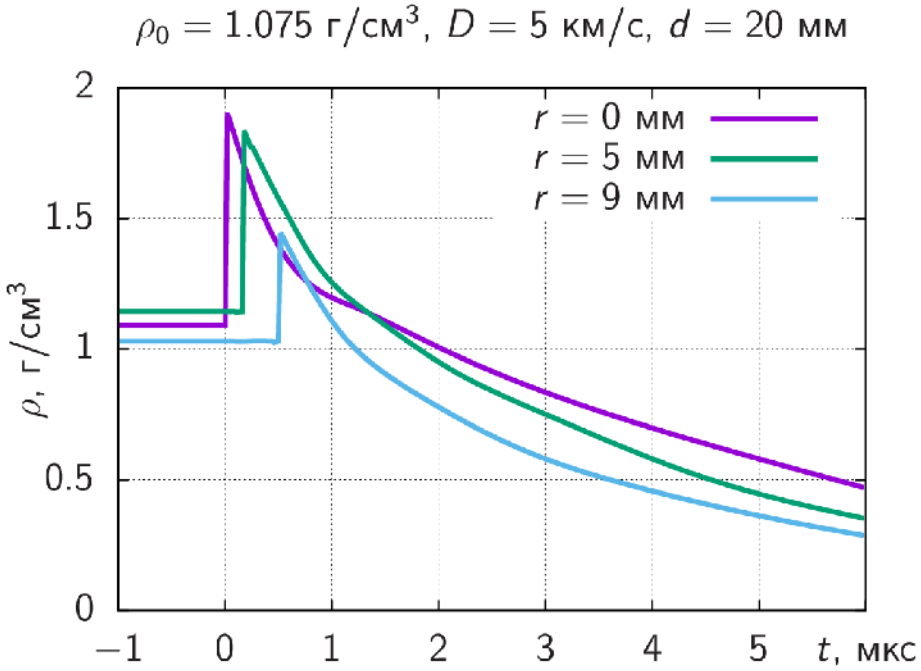


Рисунок 2.6 – Зависимости плотности от времени на разных радиусах при детонации цилиндрического заряда эмульсионного взрывчатого вещества на основе аммиачной селитры.

ляет явно выделить особенности плотности вблизи искривленного фронта, в частности, удается выделить короткую зону химической реакции (рис. 2.6).

По сравнению с инверсией Абеля, метод обладает важным преимуществом: он позволяет немного заглянуть в невидимую область разлетающихся продуктов детонации. Опорная сетка для аппроксимации плотности по радиусу строится шире области имеющихся экспериментальных данных (рис. 2.3). На краях разлетающегося облака продуктов детонации нет особенностей по плотности, и модель аппроксимации разумно доопределяет тень в области отсутствия экспериментальных данных. Для многих течений удается расширить область восстановления плотности по радиусу на 30 %. Это позволяет значительно расширить возможности методики. Так, по экспериментальным данным, заканчивающимся на радиусе 1.5 см (рис. 2.4), удается восстановить распределение плотности до радиуса 2 см (рис. 2.5)

Для работы описанного метода необходим эффективный алгоритм поиска экстремума функции от нескольких десятков переменных. При выборе под-

ходящего метода бралось во внимание два критерия. Во-первых, алгоритм должен быть устойчивым и уверенно сходиться даже для плохих стартовых приближений. Во-вторых, алгоритм должен обладать приемлемой скоростью работы. Были протестированы разные методы. Сложные алгоритмы, предполагающие гладкость функции и использующие ее производные, редко работали быстро и всегда приводили к неустойчивости метода. Совсем простые алгоритмы на основе покоординатного спуска работали медленно и неустойчиво.

Наибольшую эффективность продемонстрировал симплекс метод поиска экстремума функции многих переменных. Использовалась его реализация в виде библиотеки на языке программирования C [78].

Распределение плотности при детонации трубчатых зарядов

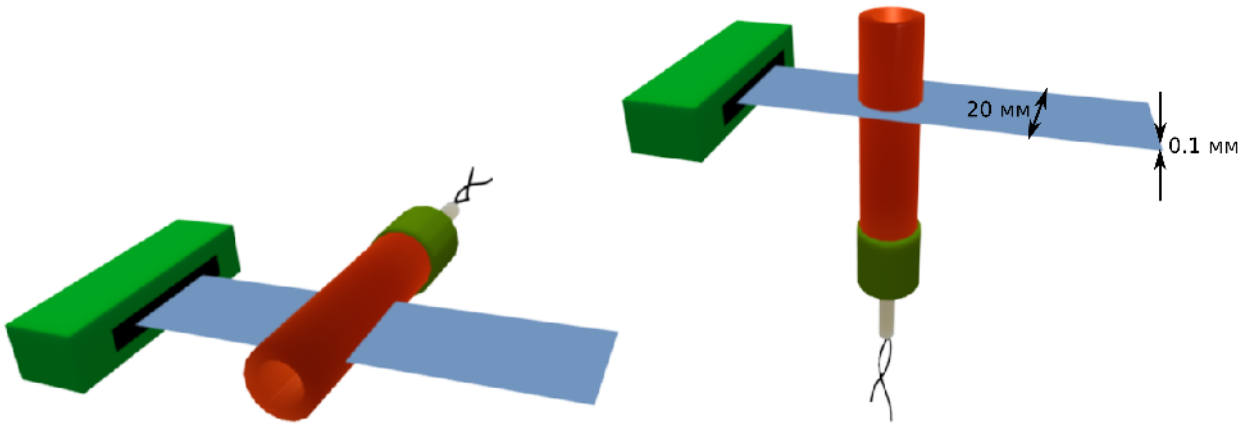
Известно, что детонация удлиненных зарядов взрывчатых веществ с полостями, заполненными воздухом, другим газом или вакуумированными, сопровождается своеобразными "канальными" явлениями [79, 80]. Прежде всего, отмечается, что внутри канала возникает и распространяется ударная волна, значительно опережающая детонационный фронт, максимальная скорость которой может в 1.5 – 2 раза превышать скорость детонации сплошного заряда [79–81]. Это может приводить как к затуханию детонации вследствие изменения структуры и плотности ВВ перед детонационным фронтом, так и к увеличению скорости детонации из-за сжатия или даже инициирования ВВ опережающей ударной волной [81, 82]. Было подмечено, что в определенных условиях при детонации полого цилиндрического (трубчатого) заряда ВВ в полости образуется и распространяется кумулятивная струя продуктов детонации (газокумулятивная струя, ГКЗ), движущаяся со сверхдетонационной скоростью. Данное явление широко используется для разгона твердых компактных частиц до скоростей космического диапазона [83, 84]. Известны и другие применения ГКЗ, например, для генерации мощных световых и электрических импульсов, упрочнения внутренних поверхностей металлических

деталей и т.д. Особенности формирования и распространения газокумулятивных струй анализировались численно [85] и в косвенных экспериментах [82, 86–88]. При этом вопрос о распределении газодинамических параметров струи до сих пор остается открытым. Имеются только оценки средних значений параметров (плотности, скорости) и отдельные попытки измерения или расчета распределения скорости и плотности вдоль струи [85, 86, 89]. Применение методики измерения параметров продуктов детонации с помощью СИ позволило провести непосредственное (in situ) измерение распределения параметров газокумулятивной струи при детонации полого цилиндрического заряда.

Постановка экспериментов. Использование СИ позволяет реализовать невозмущающий внутренний метод измерения пространственного распределения плотности продуктов детонации конденсированных ВВ, в том числе – в полости газокумулятивного заряда. Использованная методика позволяет применить принципы рентгеновской томографии и восстановить распределение плотности в продуктах детонации. Исследовались трубчатые заряды из смеси тротила с гексогеном в массовой пропорции 50% на 50% двух размеров: внешний диаметр 12 мм, внутренний – 5 мм, длина 70 мм и 16 мм на 9 мм на 60 мм соответственно. По имеющимся представлениям, выбранная длина зарядов достаточна для формирования кумулятивного течения внутри полости.

В результате экспериментов получаются распределения интенсивности прошедшего через исследуемый образец излучения по радиусу на различные моменты времени.

Эксперименты проводились в двух постановках (рис. 2.7). В первом случае заряд располагался так, что его ось совпадала с плоскостью луча (рис. 2.7, а). Полученные при этом данные позволяют получить распределение средней по сечению плотности по оси заряда. Во втором случае заряд располагался перпендикулярно плоскости луча (рис. 2.7, б), что дает возможность вос-



а) б)

Рисунок 2.7 – Постановка эксперимента для исследования детонационного течения трубчатого заряда: а – определение продольного распределения параметров, б – определение параметров в сечении исследуемого заряда.

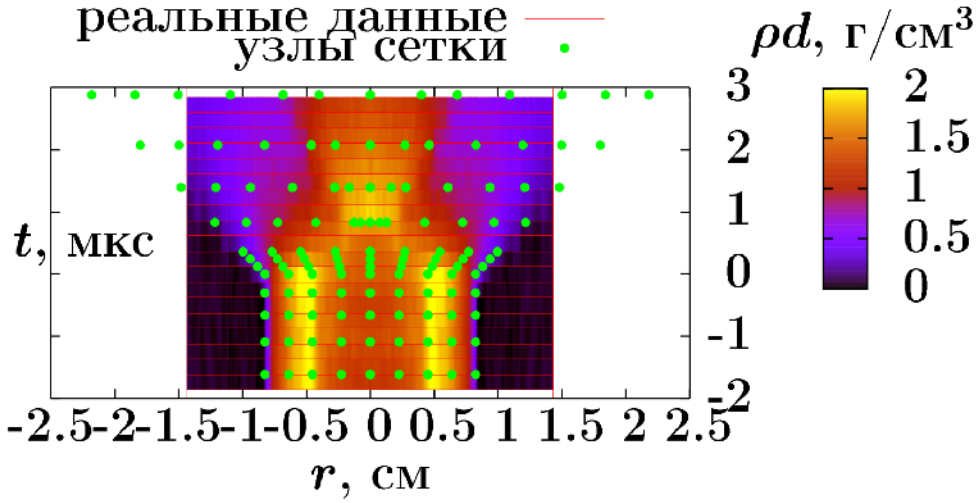
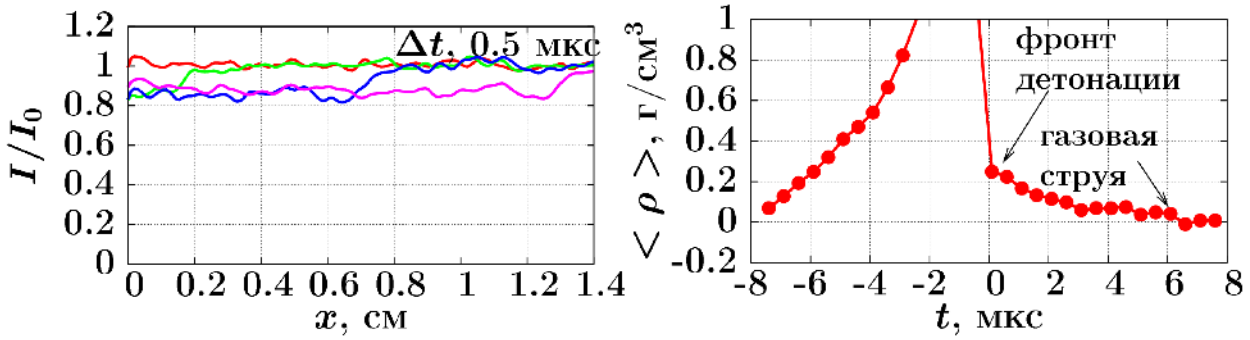


Рисунок 2.8 – Расположение опорных узлов сетки для восстановления распределения плотности.

становить распределение плотности по радиусу в фиксированном сечении в разные моменты времени.

Для восстановления распределения плотности строилась специальная сетка с выделением разрывов (рис. 2.8). Значения плотности в узлах определялись из условия наилучшего соответствия экспериментальной и модельной теней.

Результаты и их обсуждение. Результаты измерений, выполненные в первой постановке для зарядов с внешним диаметром 12 мм и отверстием



а) б)

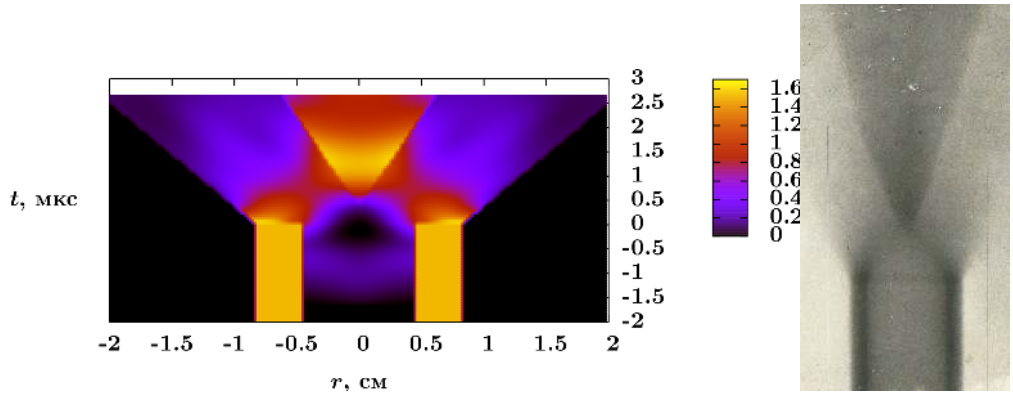
Рисунок 2.9 – Результаты продольной рентгенографии детонационного течения трубчатого заряда: а – пространственные распределение интенсивности излучения ослабленные газовой струей, б – распределение средняй по сечению плотности.

5 мм, приведены на рисунке 2.9, а в форме зависимости изменения относительной интенсивности прошедшего I и исходного I_0 излучения вдоль оси заряда. В данном случае для увеличения контрастности внутрь трубки помещался кусочек фольги, которая разрушалась и увлекалась струей.

Рассматривалась область перед фронтом детонации. Данные показывают наличие струи (падение интенсивности относительно исходного уровня), опережающей фронт детонации, и позволяют вычислить скорость переднего фронта струи, которая в этом случае равна ~ 11 км/с. Естественно, что скорость такой "утяжеленной" струи будет меньше, чем у обычной струи.

Для чистой газокумулятивной струи, без искусственно увеличенной контрастности, получена зависимость средней по радиусу плотности от времени для фиксированного сечения заряда (2.9, б). Полученные результаты хорошо соотносятся с экспериментальными данными других методик [86, 89].

Более полные и детальные данные получены в экспериментах второго типа, в которых зондирующий луч направлялся оси заряда (рис. 2.7, б). В этом случае каждый кадр дает информацию о распределении плотности по радиусу полости заряда. В предположении стационарности процесса кумуляции газообразных продуктов детонации набор кадров, полученных в последовательные моменты времени, эквивалентен пространственному распределению



а) б)

Рисунок 2.10 – Распределения плотности при детонации трубчатого заряда: а – восстановленное распределение плотности течения, б – изображение, полученное с использованием рентгеновской трубки. Иллюстрация предоставлена Мержиевским Л.А.

исследуемого параметра (плотности). Результат измерения пространственного распределения плотности показан на рисунке 2.10, а.

Полученные данные можно сравнить с обычной рентгенограммой, 2.10, б. Несмотря на различия в геометрических параметрах зарядов (на 2.10, б приведена рентгенограмма для заряда с внешним диаметром 28 мм и диаметром полости 20 мм), наблюдается однозначное качественное согласие приведенных картин разлета продуктов детонации. К сожалению, рентгеновский снимок не фиксирует самой кумулятивной струи из-за относительно ее малой плотности по сравнению с плотностью материала стенок трубчатого заряда.

Полученные результаты позволяют детализировать пространственное распределение плотности разлетающихся продуктов, в том числе и для газокумулятивной струи. На рисунке 2.11 приведены полученные распределения плотности на оси при радиусе, соответствующем середине стенки заряда.

Результаты находятся в хорошем качественном и количественном согласии с данными [86, 89]. Они показывают плавное нарастание плотности струи от ее передней кромки до некоторого максимума, после чего по мере приближения к фронту детонации плотность уменьшается и опять нарастает в области столкновения газовых потоков продуктов детонации стенок трубки.

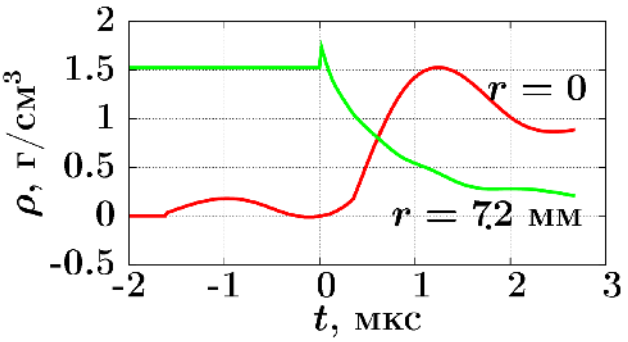


Рисунок 2.11 Зависимости плотности от времени на разных радиусах: на оси и при радиусе, соответствующем середине стенки заряда.

Подобная особенность в распределении плотности отмечалась как в [86, 89], так и в других расчетных работах. Плотность продуктов детонации в струе изменяется в диапазоне 0.05–0.2 г/см^3, что тоже хорошо согласуется с проводившимися ранее косвенными экспериментальными и расчетными оценками. Измеренная скорость передней кромки струи $\sim$ 14 км/с, что согласуется с результатами [86, 87].

Заключение. Полученные распределения плотности в струе были получены впервые. Определена скорость струи. Сравнение средних значений измеренных параметров с данными по их определению, полученными ранее с помощью косвенных методов или газодинамических расчетов, показало, что, в целом, развитые ранее представления о механизме формирования и распространения газокумулятивной струи достаточно хорошо соответствуют реальности.

Результаты работы еще раз продемонстрировали широкие возможности и перспективность применения методов, основанных на использовании синхротронного излучения, для исследования взрывных и ударно-волновых процессов.

2.1.3 Заключение

Реализован метод обращения рентгеновской тени и восстановления распределения плотности путем аппроксимации ее сеточной функцией. Метод устойчив к ошибкам измерений и гибко подстраивается под особенности те-

чения.

Для широкого списка взрывчатых веществ были определены распределения плотности детонационного течения.

Основные результаты с описанием методики томографии плотности и результатов исследования конкретных составов представлены в публикациях:

- работы с описанием методик и результатов исследований ударно-волновых течений [5, 26, 29];
- работы с описанием методик и результатов исследования инициирования детонации [1, 2, 15, 19, 23, 24, 30, 38];
- работы с описанием методик и результатов определения средней плотности детонационного течения [1–4, 8, 18, 22, 30, 38];
- работы с описанием методики и результатов томографии плотности [3, 6, 7, 12, 15, 17, 23, 24, 33];

2.2 Восстановление газодинамических параметров детонационного течения

2.2.1 Восстановление параметров течения по известному распределению плотности

Постановка общей задачи

Развитие методики скоростной рентгеновской томографии плотности, основанной на просвечивании исследуемого образца синхротронным излучением, позволяет уверенно регистрировать динамику плотности продуктов детонации цилиндрических зарядов конденсированного взрывчатого вещества.

Полученные в результате восстановления данные для стационарной волны детонации позволяют по интерполяционным соотношениям восстановить плотность для произвольной точки в фиксированном сечении в виде функции $\rho(r,t)$ или используя стационарность течения в системе отсчета фрон-

та в виде функции $\rho(r, z)$. Используя эти данные можно поставить задачу о восстановлении других механических параметров течения, например, полей вектора массовой скорости и давления. Для этого необходимо разрешить систему уравнений стационарной газовой динамики (2.3, 2.4) относительно неизвестных функций $\vec{v}(r, z)$ и $p(r, z)$ при известном распределении плотности в течении:

$$\operatorname{div}(\rho\vec{v}) = 0, \tag{2.3}$$

$$\operatorname{div}(\rho v\vec{v}) + \nabla p = 0. \tag{2.4}$$

Предложение описывать исследуемое течение уравнениями сохранения потока массы (2.3) и импульса (2.4) является достаточно общим и подходит для широкого круга явлений, описываемых односкоростными моделями газовой динамики с простым тензором потока импульса, сводящимся а скалярному давлению p.

Особенностью метода является отсутствие уравнения энергии и часто замыкающего систему уравнений газовой динамики уравнения состояния. Вместо этого система замыкается известным из эксперимента пространственным распределением плотности. Более того, в рассматриваемой системе напрямую почти нет термодинамики: уравнение состояния, скорость звука и т.д., все это косвенно проявляется в виде известного из эксперимента пространственного распределения плотности. Это не традиционно для решения уравнений газовой динамики, для корректных постановок задачи, основанной только на уравнениях механики, требует дополнительного анализа.

Прямое совместное решение системы (2.3, 2.4) при известной зависимости $\rho(r, z)$ и соответствующих граничных условиях представляется вполне вероятным, но корректная математическая постановка не так проста и требует дополнительных исследований. В общем случае уравнения газовой динамики являются эффективным средством для регуляризации задачи томографии

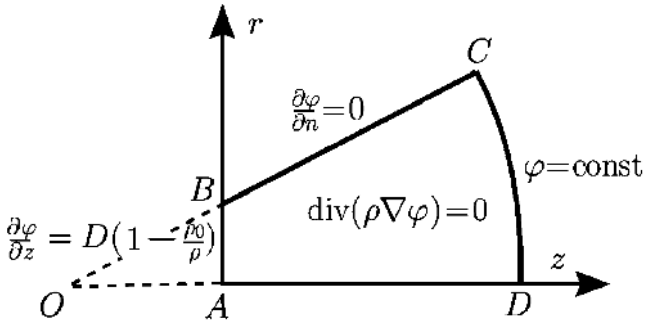


Рисунок 2.12 – Схема граничных условий для определения скалярного потенциала скорости течения.

плотности и значительно сужают класс искомых решений и в конечном итоге это позволяет повысить точность измерений. Необходимо найти распределение плотности, не просто хорошо подходящее под рентгеновскую тень и достаточно гладкое, но и соответствующее исследуемому газодинамическому течению.

Восстановление газодинамических параметров потенциального течения

В работах [9, 13] автором был предложен метод решения описанной выше системы (2.3, 2.4), основанный на введении дополнительного требования к течению – существовании скалярного потенциала вектора массовой скорости. При этом, рассматриваемая система распадается на независимые уравнения, которые разрешаются последовательно.

Введем скалярный потенциал скорости $\varphi(r, z)$, $\vec{v} = \nabla\varphi$. Для определения массовой скорости необходимо решить уравнение Лапласа

$$\mathrm{div}(\rho\nabla\varphi) = 0 \tag{2.5}$$

с граничными условиями (рис. 2.12).

Уравнение (2.5) решалось численно методом итераций по явной схеме. Результаты восстановления представлены на рисунке 2.13.

Для восстановления распределения давления векторное уравнение (2.4) переписывалось в виде двух скалярных:

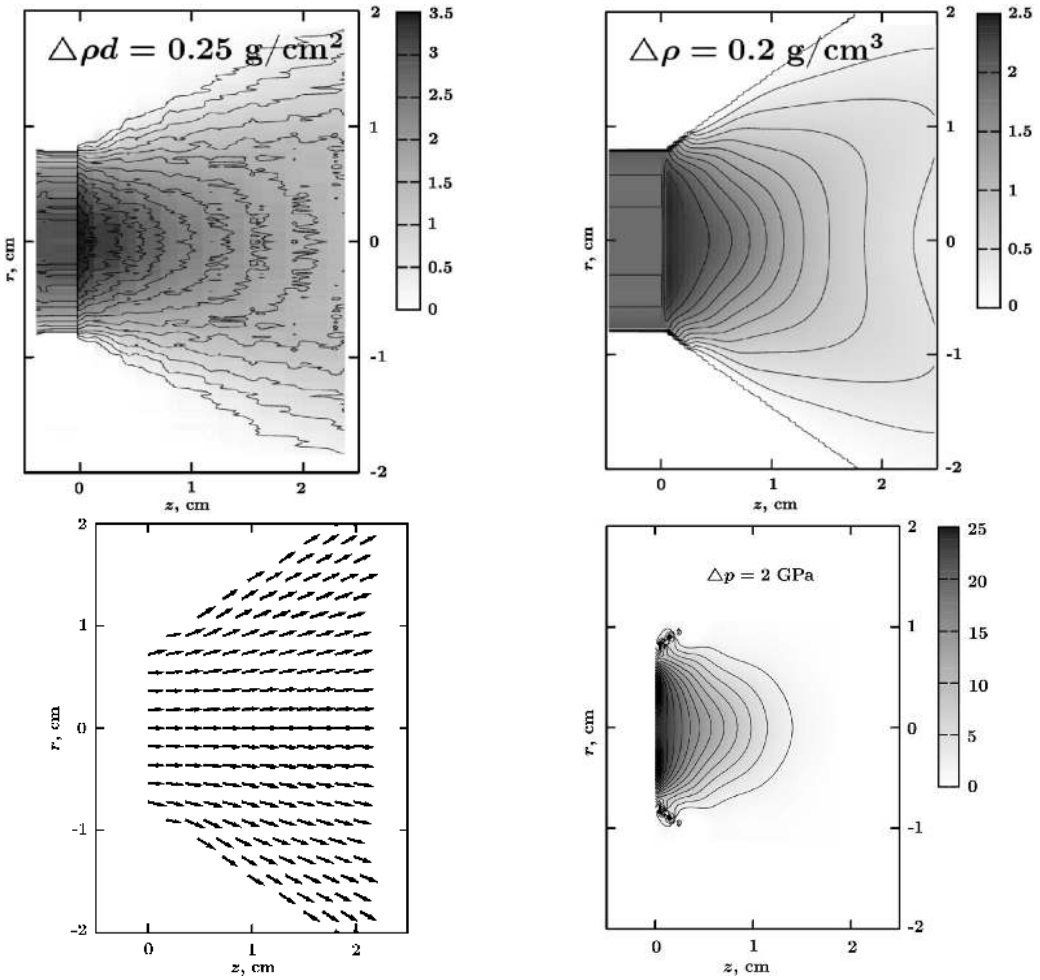


Рисунок 2.13 – Распределения газодинамических параметров течения при детонации заряда тротила с начальной плотностью $\rho_0 = 1.63$ г/см^3, скорость детонации 6.8 км/с: тень, плотность, вектор массовой скорости, давление.

$$\frac{\partial \rho v_z^2}{\partial z} + \frac{1}{r}\frac{\partial r \rho v_z v_r}{\partial r} = -\frac{\partial p}{\partial z}, \tag{2.6}$$

$$\frac{\partial r \rho v_r^2}{\partial r} + r\frac{\partial \rho v_z v_r}{\partial z} = -r\frac{\partial p}{\partial r}. \tag{2.7}$$

Дифференцируя уравнение (2.6) по z, уравнение (2.7) по r и складывая результаты, получаем уравнение Пуассона для давления

$$\Delta p = -\left(\frac{\partial^2 \rho v_z^2}{\partial z^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial^2 r \rho v_r^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial^2 r \rho v_r v_z}{\partial r z}\right), \tag{2.8}$$

где правая часть уже известная функция. Уравнение (2.8) решалось численно на той же расчетной области (рис. 2.12).

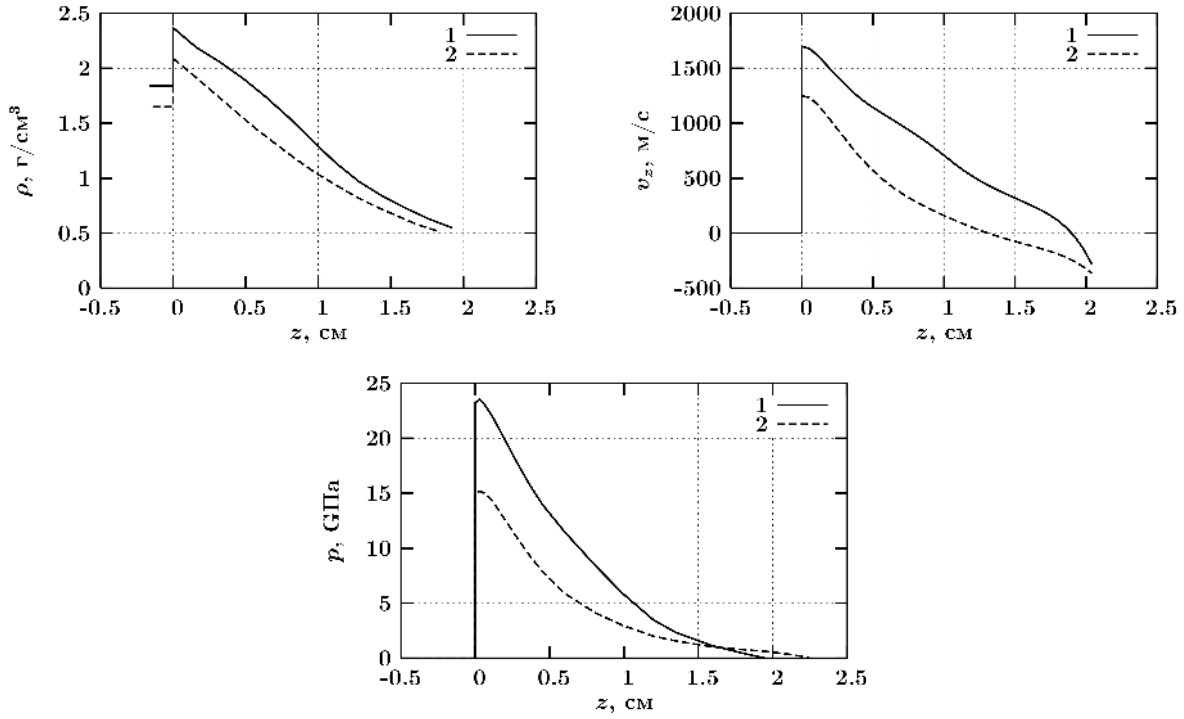


Рисунок 2.14 – Распределения плотности, компоненты v_z массовой скорости и давления на оси заряда при детонации: 1 – заряд из смеси тротила с гексогеном с начальной плотностью $\rho_0 = 1.7$ г/см^3; 2 – заряд из тротила с начальной плотностью $\rho_0 = 1.6$ г/см^3.

Граничные условия на стороне AB определяются из сохранения массового потока и импульса на разрыве. На сторонах BC и CD давление падает до малых значений в сравнении с максимальными; было принято равным нулю в расчетах.

На оси DA использовались условия симметрии; тогда $\partial p/\partial r = 0$. Уравнение (2.8) решалось численно с помощью итераций, аналогично уравнению (2.5). Результаты восстановления распределения давления $p(r, z)$ представлены на рисунке 2.13.

Для демонстрации численных значений, на рисунке (2.14) представлены распределения газодинамических параметров вдоль оси детонационного течения. Полученные значения разумно соотносятся со значениями других методик.

В целом, методика восстановления газодинамических параметров, основанная на введении скалярного потенциала скорости, дает разумные резуль-

таты, но ряд нерешенных проблем ограничивает ее активное использование. Нет строгого математического обоснования корректности восстановления газодинамических параметров. Для чуть более сложных детонационных течений с искривленным фронтом сложно соблюсти корректные граничные условия. Легко привести контрпример течения с касательным разрывом продольной компоненты скорости, где нельзя ввести скалярный потенциал для скорости.

По указанным причинам методика не получила дальнейшего распространения, но ее методическое влияние важно. Она позволила впервые по данным плотности последовательно восстановить распределения вектора массовой скорости и скалярного давления [9, 13].

2.2.2 Восстановление параметров течения по известному распределению давления

Использование скалярного потенциала скорости является разумным для исследования баротропных течений. Если связь плотности и давления более сложная, метод может вносить значительные искажения, а восстановление массовой скорости и давления по известной плотности может оказаться неоднозначным.

Ситуацию можно значительно улучшить, поставив другую задачу. 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 на плоскости при известном распределении давления – $p(x, y)$, структура течения изображена на рисунке (рис. 2.15). Для простоты будем рассмотрим плоскую задачу. Цель – показать, что эта систему сходна

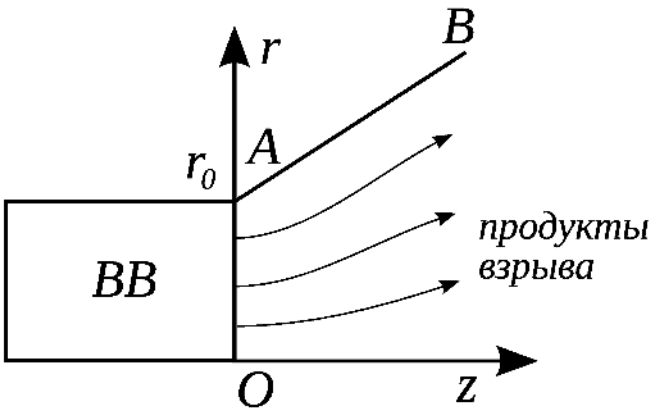


Рисунок 2.15 Схема течения и область расчета детонационного течения в системе фронта.

с гиперболической относительно направления вдоль линий тока.

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

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

Определим тип системы дифференциальных уравнений и найдем уравнения характеристик.

$$\begin{pmatrix} \rho & 0 & u & 0 & \rho & v \\ 2\rho u & 0 & u^2 & \rho v & \rho u & uv \\ \rho v & \rho u & uv & 0 & 2\rho v & v^2 \\ dx & 0 & 0 & dy & 0 & 0 \\ 0 & dx & 0 & 0 & dy & 0 \\ 0 & 0 & dx & 0 & 0 & dy \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_x \\ v_x \\ \rho_x \\ u_y \\ v_y \\ \rho_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -p_x \\ -p_y \\ du \\ dv \\ d\rho \end{pmatrix}$$

$$(vdx - udy)^3 = 0$$

Получаем три одинаковых вещественных характеристики направленных вдоль линии тока – $dy/dx = v/u$.

Найдем соотношения на характеристиках.

$$\begin{pmatrix} \rho & 0 & u & 0 & \rho & v \\ 2\rho u & 0 & u^2 & \rho v & \rho u & uv \\ \rho v & \rho u & uv & 0 & 2\rho v & v^2 \\ u & 0 & 0 & v & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 0 & v & 0 \\ 0 & 0 & u & 0 & 0 & v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_x \\ v_x \\ \rho_x \\ u_y \\ v_y \\ \rho_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -p_x \\ -p_y \\ \sqrt{u^2+v^2}\, du/dl \\ \sqrt{u^2+v^2}\, dv/dl \\ \sqrt{u^2+v^2}\, d\rho/dl \end{pmatrix}$$

$$du/dl = -p_x/(\rho\sqrt{u^2+v^2}),$$

$$dv/dl = -p_y/(\rho\sqrt{u^2+v^2}),$$

$$d\rho/dl = -\rho(u_x+v_y)/(u^2+v^2)^{1/2}$$

Получившаяся структура характеристик соответствует гиперболической системе и позволяет восстановить все неизвестные зависимости пространственных распределений плотности и компонент массовой скорости, последовательно двигаясь от фронта детонационной волны вдоль линий тока.

Для течения с цилиндрической симметрией получаются близкие соотношения.

Запишем систему уравнений газовой динамики:

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

Найдем уравнения характеристик.

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

Найдем соотношения на характеристиках.

$$du/dl = -p_r/(\rho\sqrt{u^2+v^2}),$$

$$dv/dl = -p_z/(\rho\sqrt{u^2+v^2}),$$

$$d(r\rho)/dl = -r\rho(u_r + v_z)/(u^2+v^2)^{1/2}.$$

Полученные соотношения на характеристиках позволяют реализовать метод решения исследуемой системы уравнений и восстановить параметры течения по известному распределению давления.

Проанализированная система "похожа" на гиперболическую. Полученные соотношения вдоль характеристик позволяют реализовать явный метод определения плотности и двух компонент массовой скорости, двигаясь от фронта по всей области, занятой потоком. Данный подход был реализован и показал свою состоятельность. Строгое обоснование корректности разрешимости уравнений газовой динамики при заданном распределении давления и обоснование устойчивости метода решения пока не проведено.

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.

Примеры восстановления параметров течения

Предложенная методика была применена для восстановления параметров течения, возникающего при детонации цилиндрических зарядов конденсированных взрывчатых веществ.

Для определения пространственного распределения плотности в детонационной волне использовалась методика рентгеновской томографии, описанная выше. За один эксперимент в фиксированном сечении измерялась рентгеновская тень от детонирующего заряда с шагом между кадрами 0.496 мкс.

В работе предполагается, что исследуется стационарная детонационная волна, распространяющаяся с постоянной известной скоростью D и с установившимся течением за фронтом волны. Диаметр зарядов составлял 20 мм, расстояние от инициируемого торца до наблюдаемого сечения 25 мм. Инициирование осуществлялось генератором плоской волны.

Используя описанную методику, были восстановлены параметры течения при детонации зарядов на основе ТАТБ, изготовленных по разным технологиям: ТАТБ1 более чувствительный, ТАТБ2 менее чувствительный (рис. 2.16, 2.17) и (рис. 2.18, 2.19).

Заряды ТАТБ1 уверенно детонируют в исследованной постановке. Доля непрореагировавшего материала на поверхности заряда мала, продукты реакции разлетаются в виде газа, зависимость плотности от радиуса монотонно спадает до нуля (рис. 2.16 б). Пиковые значения давления, массовой скорости и плотности близки (рис. 2.17) – можно говорить о плоском детонационном фронте с однородными параметрами по сечению.

При детонации зарядов ТАТБ2 наблюдается заметная зона не реагирующего вещества. Значительная часть заряда у поверхности не реагирует и разлетается не в виде газообразных продуктов взрыва, а в виде пыли и фрагментов из исходного материала заряда. На зависимостях плотности от радиуса хорошо видны не монотонность (рис. 2.18 б). Детонирует только центральная часть заряда, периферия ведет себя как инертная оболочка. Пиковые значе-

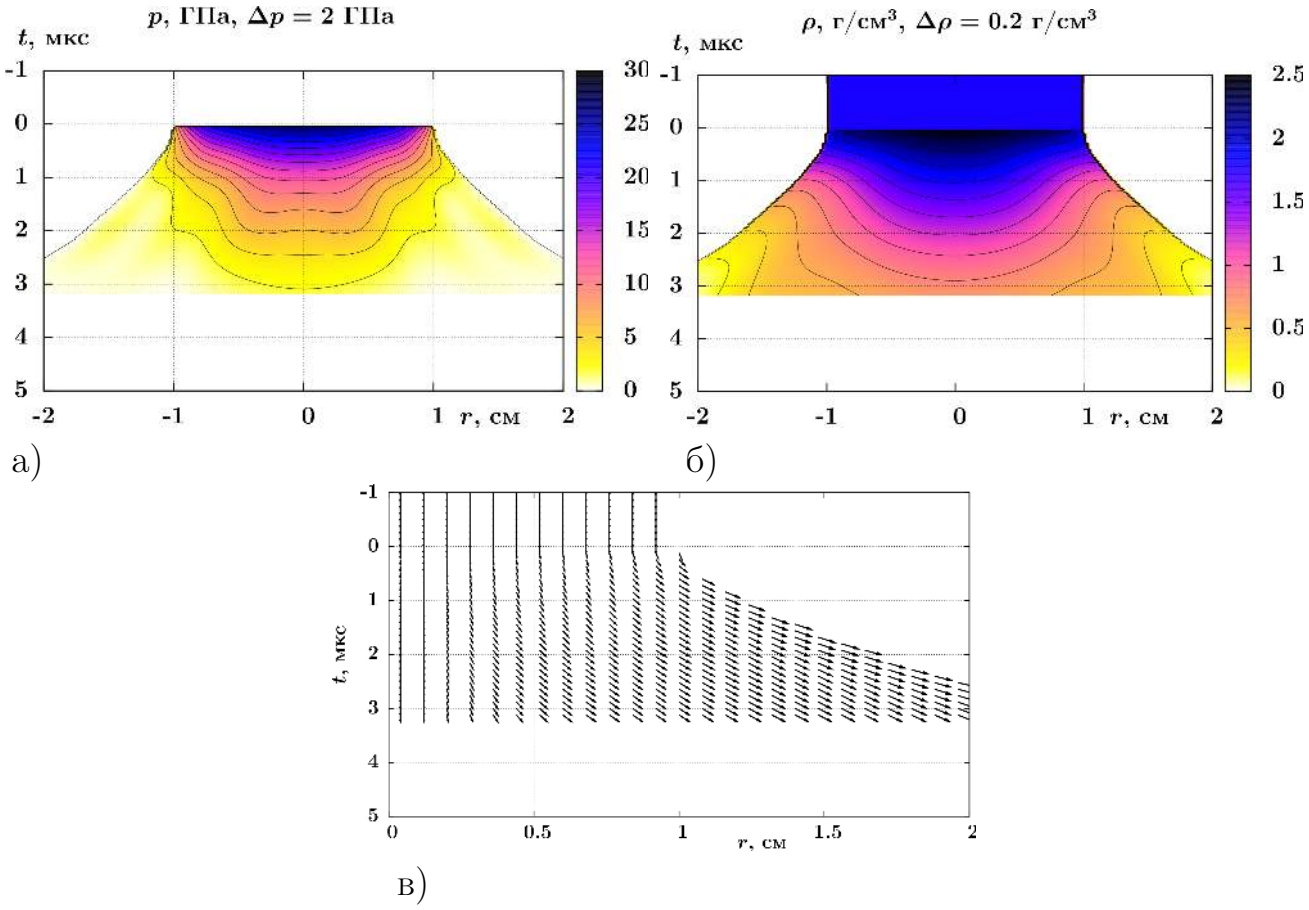


Рисунок 2.16 – Параметры течения при детонации заряда ТАТБ1: а – давление, б – плотности, в – вектор массовой скорости.

ния давления, массовой скорости и плотности значительно разнятся (рис. 2.19) – нельзя говорить о плоском детонационном фронте с однородными параметрами по сечению.

Адиабата разгрузки продуктов взрыва

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. 2.20, 2.21).

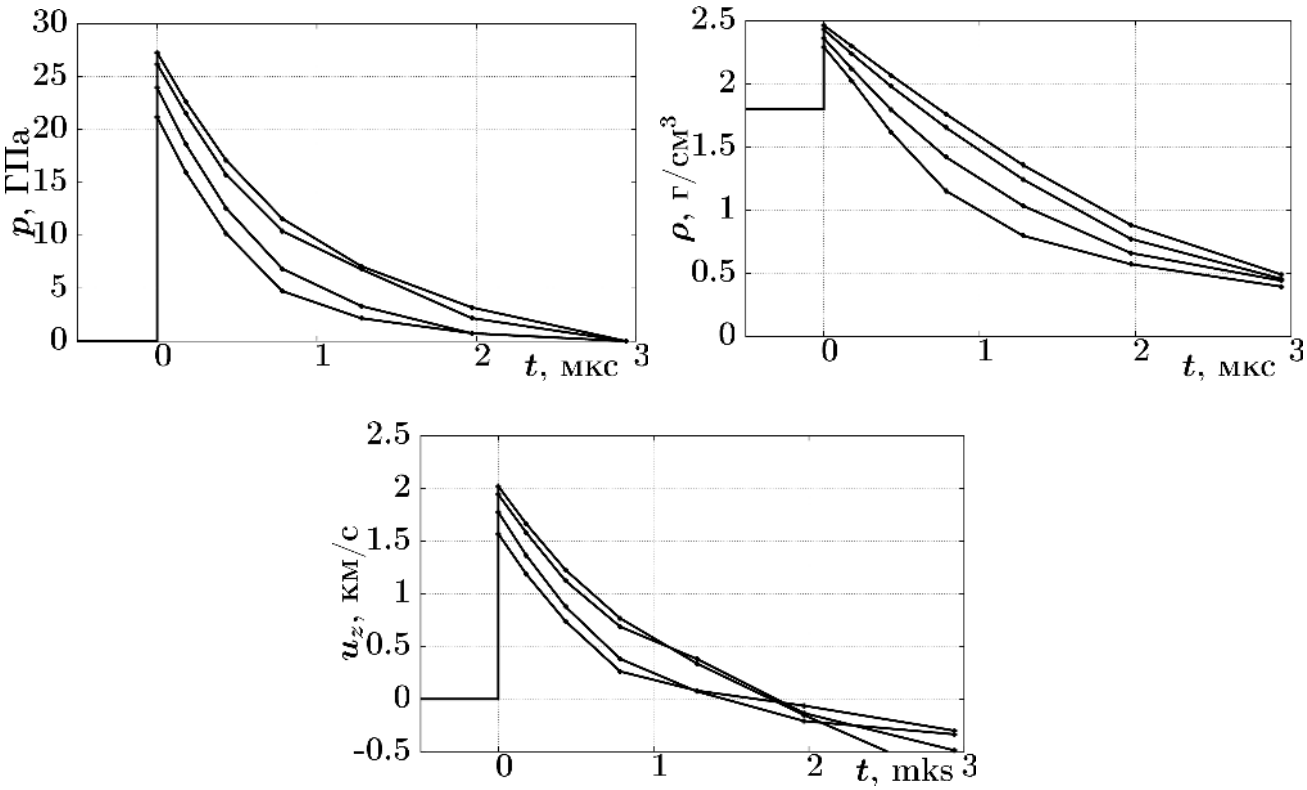


Рисунок 2.17 – Динамика давления, плотности и массовой скорости вдоль линий тока. Заряд ТАТБ1.

Полученный результат разумно согласуется с часто используемым приближенным уравнением состояния в виде политропного газа, $p/\rho^{\gamma} = const$. При этом, наилучшее соответствие для диапазона плотностей от 1.5–2.5 г/см^3 достигается для $\gamma \approx 3$, что согласуется с данными работ [90, 91].

Для диапазона плотностей от 1.0–1.5 г/см^3 наблюдается изменение наклона графиков зависимости давления от плотности в логарифмическом масштабе, что соответствует части перехода уравнения состояния между двумя предельными случаями: плотное вещество с $\gamma \approx 3$, идеальный газ с $\gamma \approx 1.4$.

Для заряда ТАТБ1 можно говорить об общем уравнении состояния для всех продуктов взрыва. За исключением линий тока, близких к краю адиабаты разгрузки, в координатах давление-плотность близки (рис. 2.20). Для заряда ТАТБ2 говорить об уравнении состояния продуктов взрыва нельзя – адиабаты разгрузки в координатах давление-плотность сильно отличаются (рис. 2.21).

Указанная особенность является сильной стороной метода восстановле-

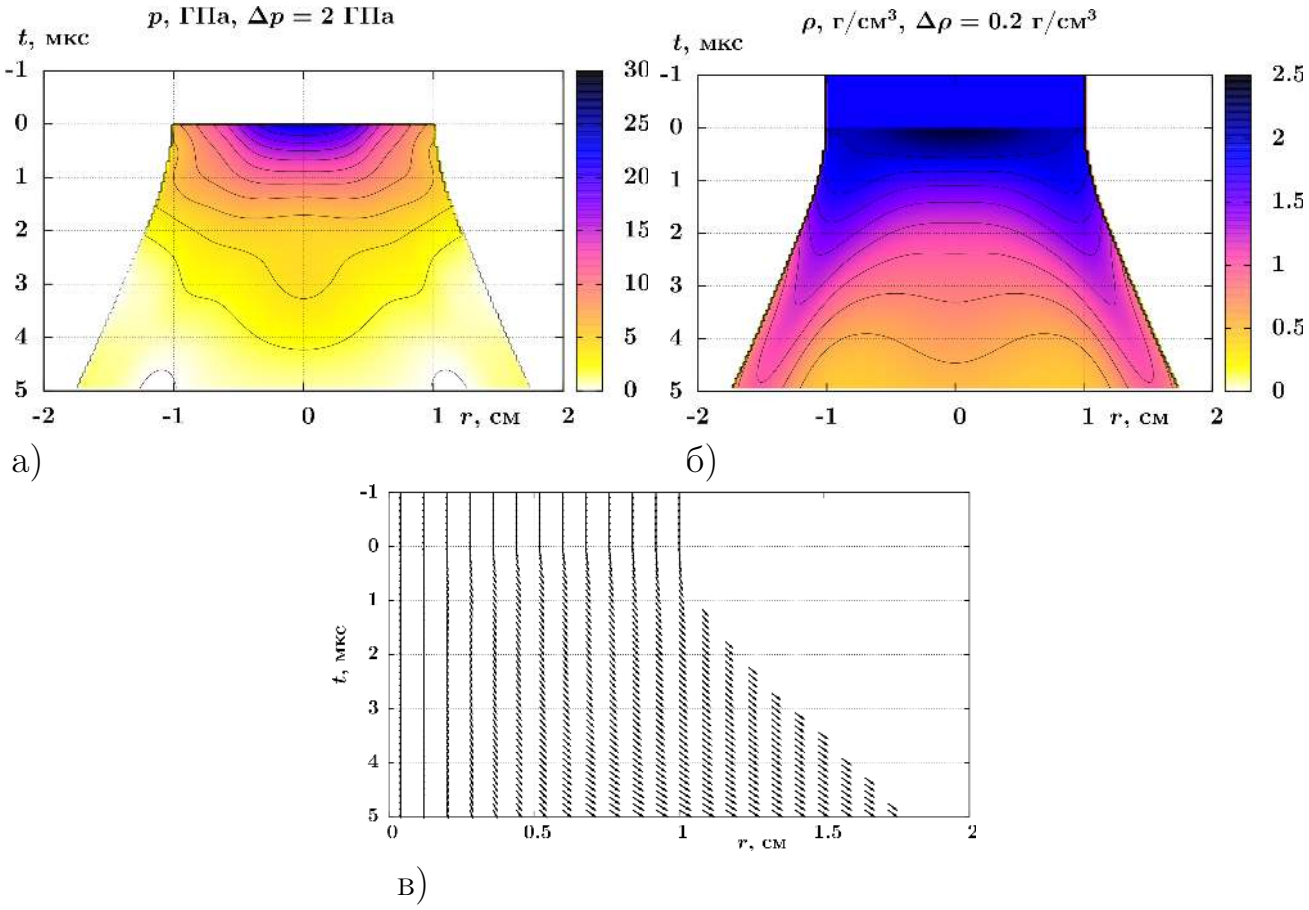


Рисунок 2.18 – Динамика давления, плотности и массовой скорости. Заряд ТАТБ2.

ния газодинамических параметров детонационного течения: его можно применять для сложных объектов, когда связь давления и плотности неоднозначна. Для составов, детонирующих без особенностей, показано, что можно говорить об одном уравнении состояния всей области течения, при котором давление зависит только от плотности ($p = \Pi(\rho)$).

Заключение

Предложен метод определения механических параметров стационарного течения газа: полей плотности, давления и вектора массовой скорости по измеренной в эксперименте рентгеновской тени детонационного течения. Метод основывается на подборе пространственного распределения давления, при котором формируется течение с рентгеновской тенью хорошо соответствующей эксперименту. Метод применим для течений с разным уравнением состояния

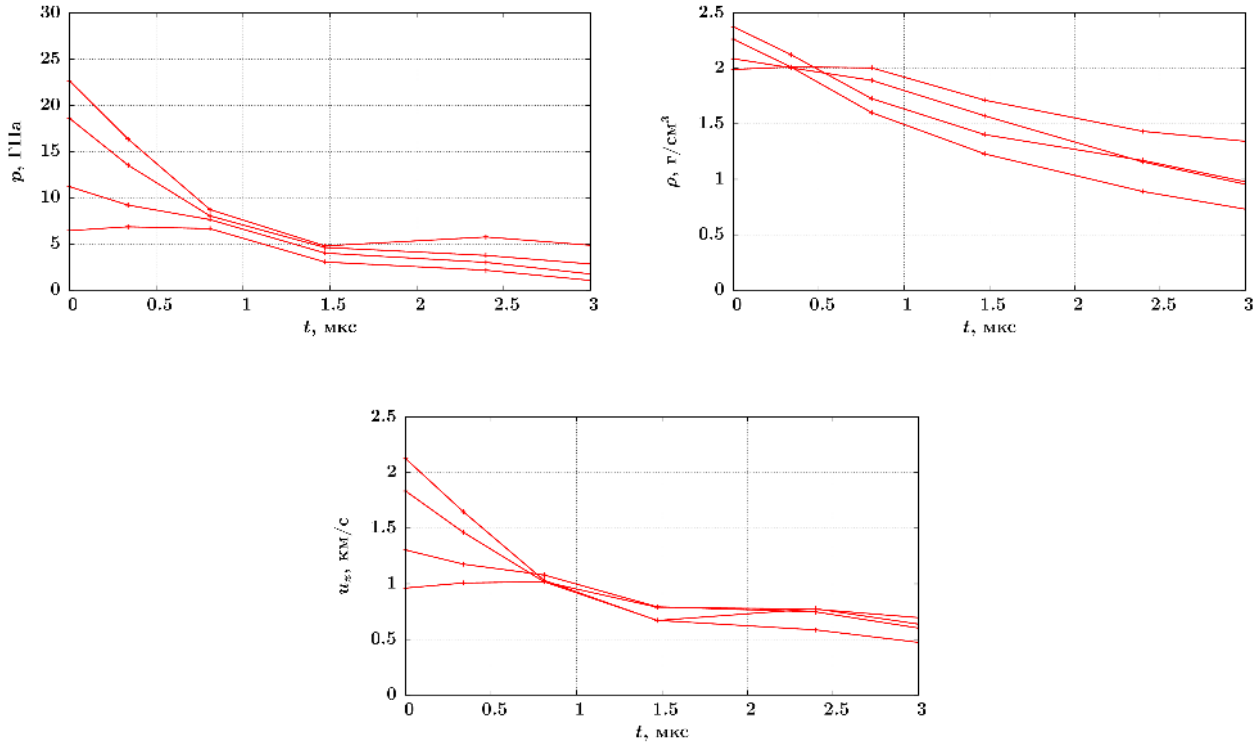


Рисунок 2.19 – Динамика давления, плотности и массовой скорости вдоль линий тока. Заряд ТАТБ2.

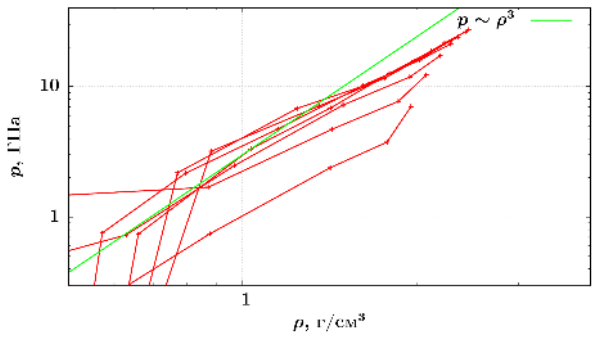


Рисунок 2.20 – Адиабата разгрузки продуктов детонации вдоль линий тока для заряда ТАТБ1.

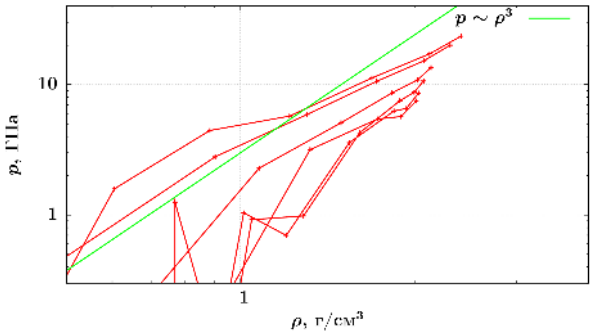


Рисунок 2.21 – Адиабата разгрузки продуктов детонации вдоль линий тока для заряда ТАТБ2.

на разных трубках тока, в том числе с химическими реакциями.

Совместное использование данных скоростной рентгеновской томографии плотности и представленной методики позволило определить пространственные распределения плотности, скорости и давления для стационарной детонации цилиндрически-симметричных зарядов чистого и пластифицированного ТАТБ.

По полученным данным построены адиабаты разгрузки продуктов взрыва в координатах давление–плотность.

Метод пока не имеет строгого математического обоснования корректности постановки – отчасти это сдерживает его развитие. Следует отметить перспективу его развития для анализа детонационного течения в зоне химической реакции, где понятие уравнения состояния размывается, но можно говорить о газодинамических параметрах течения: скалярном давлении, массовой скорости и плотности.

2.2.3 Восстановление баротропного уравнения состояния продуктов детонации

Постановка газодинамической задачи

Для широкого круга составов, детонирующих без особенностей, описанная выше методика восстановления независимых полей плотности и давления дает избыточную информацию. Часто достаточно одного уравнения состояния,

в среднем хорошо описывающего все течение и определяющего параметры Чепмена-Жуге для плоского детонационного фронта.

Основной идеей метода является подбор уравнения состояния продуктов взрыва, при котором формируется детонационное течение расширяющихся газов хорошо соответствующее рентгеновской тени измеренной в эксперименте. Прообразом подхода является, успешно применяемый на практике, "цилиндр тест" – метод в котором равнение состояния подбирается по динамике разлета пластичной металлической оболочки детонирующего цилиндрического заряда [92]. В предложенном подходе оболочка, ограничивающая продукты взрыва, отсутствует, а параметры уравнения состояния подбираются из условий наилучшего соответствия рентгеновской тени с учетом распределения плотности продуктов взрыва от радиуса.

В основе метода восстановления полей газодинамических характеристик детонационного течения лежит численное решение газодинамической задачи в постановке, соответствующей эксперименту (рис. 2.22). Рассмотрим задачу о цилиндрически симметричном нестационарном течении газа, в этом случае в эйлеровых координатах уравнения неразрывности, движения и баротропное уравнение состояния имеют вид:

$$\begin{gathered} \frac{\partial r\rho u}{\partial r} + \frac{\partial r\rho v}{\partial z} = \frac{\partial r\rho}{\partial t}, \\ \frac{\partial r\rho u^2}{\partial r} + \frac{\partial r\rho uv}{\partial z} + r\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{\partial r\rho u}{\partial t}, \\ \frac{\partial r\rho v^2}{\partial z} + \frac{\partial r\rho uv}{\partial r} + r\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\partial r\rho v}{\partial t}, \\ p = \Pi(\rho), \end{gathered} \tag{2.9}$$

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.

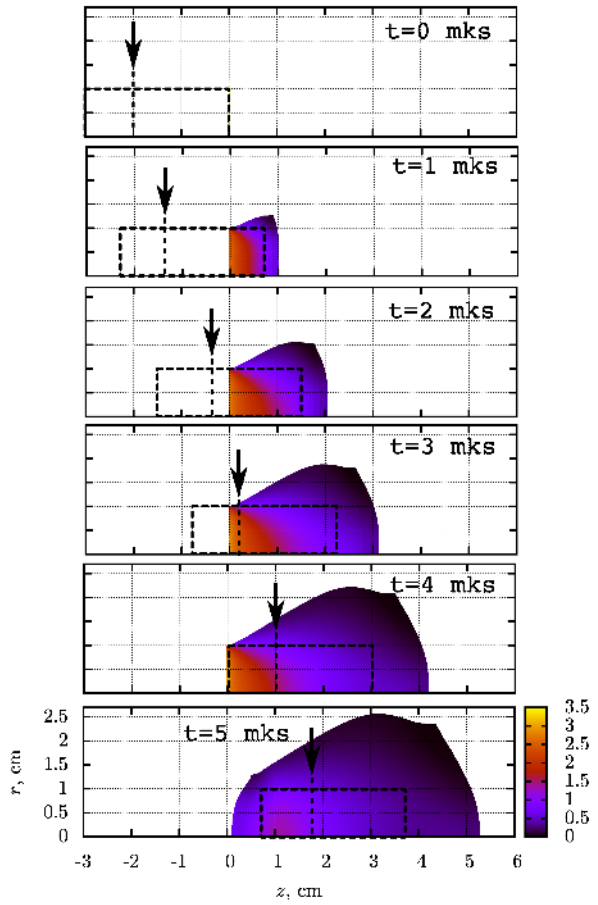


Рисунок 2.22 – Схема постановки газодинамической задачи по расчету детонационного течения. Пунктирной линией обозначены начальные границы заряда. Стрелкой указано положение исследуемого сечения.

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 – $\rho_0 D^2$. На изменяющейся контактной границе продукты взрыва – воздушная атмосфера задавались граничные условия, соответствующие распаду разрыва. Течение в окружающем заряд воздухе не рассчитывалось.

Газодинамическая задача в такой постановке корректна для разумных зависимостей $\Pi(\rho)$ и хорошо исследована. Условия сверхзвукового течения выполняются во всей области, за исключением границы вдува нового вещества,

условия Чепмена-Жуге дают точное равенство локальной скорости звука и скорости потока. Подробно эта особенность не исследовалась, небольшое локальное отклонение не влияет на общую устойчивость вычислительного алгоритма.

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

$$\Pi(\rho) = p_J(\rho/\rho_J)^{G(\rho)}, \tag{2.10}$$

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:

$$c = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)^{1/2} = \left[p_J(\rho/\rho_J)^{G(\rho)}\left(\frac{G(\rho)}{\rho} + G'(\rho)\ln(\rho/\rho_J)\right)\right]^{1/2}, \tag{2.11}$$

$$\gamma = \frac{\partial p}{\partial \rho}\frac{\rho}{p} = G(\rho) + \rho G'(\rho)\ln(\rho/\rho_J), \tag{2.12}$$

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

В точке Чепмена-Жуге, при заданном G_J, выполняются следующие соотношения:

$$p_J = \frac{\rho_0 D^2}{G_J + 1},$$
$$\rho_J = \rho_0 \frac{G_J + 1}{G_J},$$
$$u_J = \frac{D}{G_J + 1},$$
$$c_J = \frac{G_J}{G_J + 1} D,$$
$$\gamma_J = G_J.$$

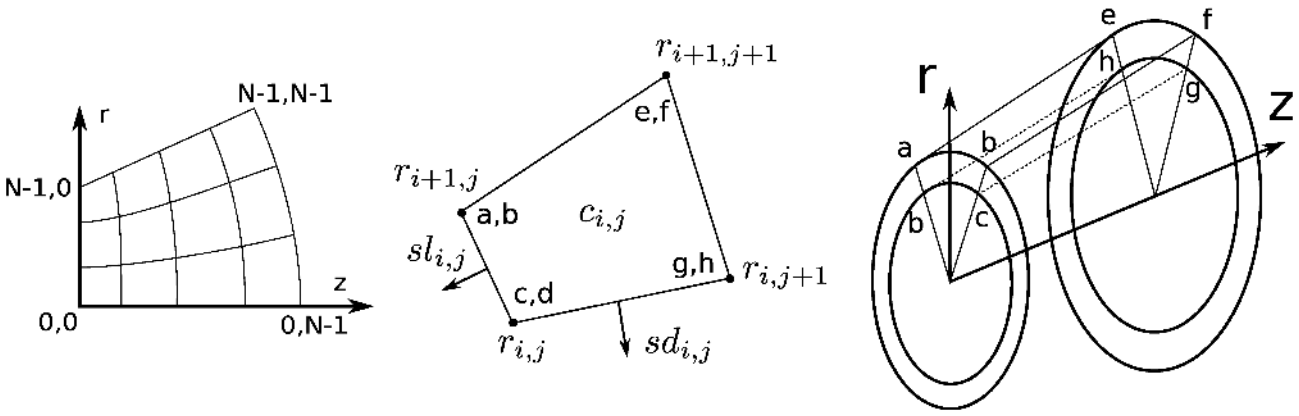


Рисунок 2.23 – Схема построения расчетной сетки: общая геометрия и нумерация узлов; 2d ячейка с границами; соответствующая ей 3d ячейка.

Численный метод решения уравнений газовой динамики

Система дифференциальных уравнений (2.9) решалась численно методом Годунова [93, 94], 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.

Схема построения сетки и нумерации узлов представлена на рисунке (2.23). Для вычисления потоков в методе Годунова нелинейная задача распада разрыва решалась в акустическом приближении. При этом давление p_z и массовая скорость u_z на контактной границе ячеек с параметрами p_1, ρ_1, u_1 и p_2, ρ_2, u_2 (давление, плотность и нормальная к границе ячеек компонента массовой скорости соответственно) вычислялись по формулам:

$$u_z = (p_1 - p_2 + \rho_1 c_1 u_1 + \rho_2 c_2 u_2)/(\rho_1 c_1 + \rho_2 c_2),$$

$$p_z = (p_1 \rho_2 c_2 + p_2 \rho_1 c_1 + \rho_1 c_1 \rho_2 c_2 (u_1 - u_2))/(\rho_1 c_1 + \rho_2 c_2).$$

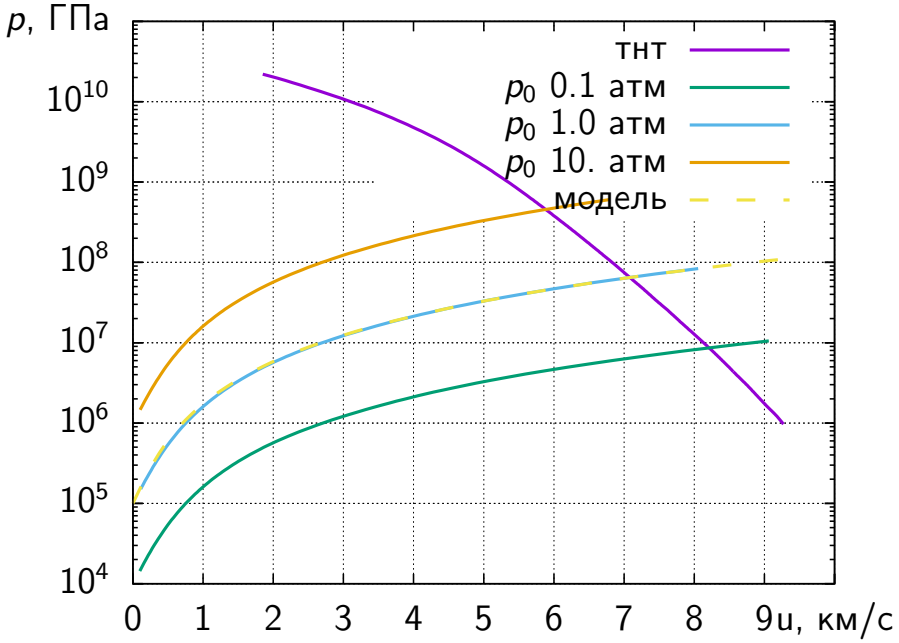


Рисунок 2.24 – Диаграмма давление–массовая скорость для продуктов взрыва и атмосферы воздуха: тнт – адиабата разгрузки продуктов детонации заряда тротила с начальной плотностью 1.63 г/см^3 [96]; p_0 (0.1, 1.0, 10) – ударные адиабаты воздуха для разных начальных давлений [95]; модель – приближенная ударная адиабата воздуха при начальном давлении 1 атмосфера $p(u) = 1.23u^2 + 1.2 \cdot 330u + 10^5$.

Распад разрыва продукты взрыва – атмосфера воздуха

Для вычисления граничных условий на сторонах ячеек, сопряженных с атмосферой воздуха, окружающей расширяющиеся продукты взрыва, сочленялись два течения: ударная волна в воздухе и волна разрежения в продуктах взрыва.

Для построения приближенной ударной адиабаты воздуха использовался полином второй степени от массовой скорости $p(u) = 1.23u^2 + 1.2 \cdot 330u + 10^5$, где давление p измеряется в паскалях, массовая скорость u в метрах в секунду. Множители при малых степенях скорости заданы из условий соответствия ударным волнам слабой интенсивности. Коэффициент при u^2 подбирался из условий наилучшего соответствия вычисленной ударной адиабате [95]. Построенная модель хорошо описывает параметры распада разрыва между продуктами детонации и атмосферой воздуха (рис. 2.24).

Учет взаимодействия расширяющихся продуктов детонации с атмосферой воздуха слабо влияет на параметры восстановленного уравнения состояния $\Pi(\rho)$. В основном структура течения определятся разлетом при больших давлениях, до одного ГПа. Учет противодавления атмосферы необходим для ограничения значительного расширения расчетных ячеек, приводящего к искривлению расчетной сетки и к потере устойчивости разностной схемы. Чтобы устойчиво моделировать критическую структуру течения вблизи фронта на больших временах (10 мкс), необходимо корректно моделировать второстепенную область значительного расширения.

Подбор параметров уравнения состояния

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.

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 $\vec{v}(r,z,t)$.

Значения G_i в опорных узлах определялись численно из условий наилучшего соответствия экспериментальной рентгеновской тени и от тестируемого распределения плотности $\rho(r,z,t)$ в исследуемом сечении (рис. 2.22). Для этого многократно решалась газодинамическая задача, и подбирались значения G_i. В качестве меры качества соответствия использовалась сумма квадратов разностей двух теней по всем точкам, измеренным в эксперименте.

Для решения нелинейной задачи оптимизации и поиска экстремума функции нескольких переменных использовался симплекс метод в библиотеке численных методов GNU Scientific Library на языке программирования C [78].

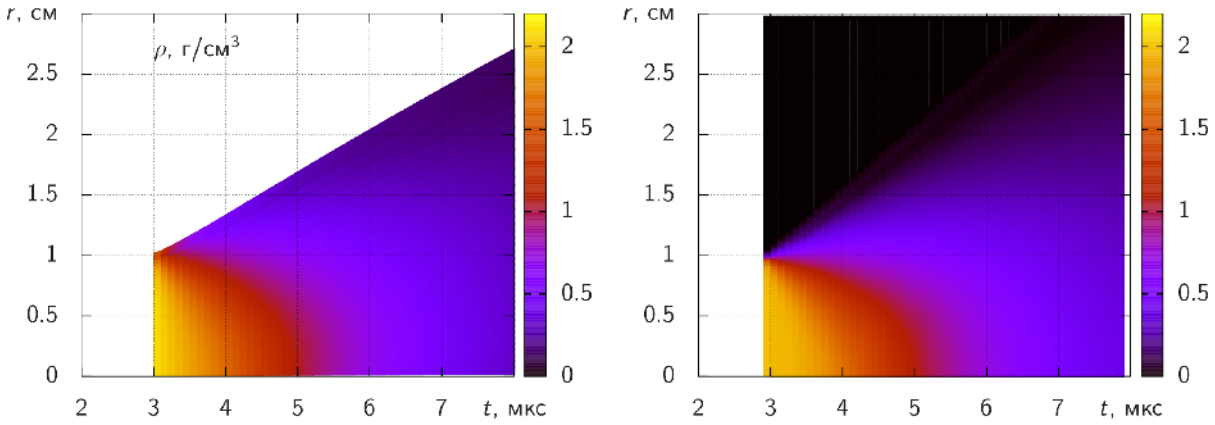


Рисунок 2.25 – Сравнение двух расчетов детонационного течения. Распределения плотности в разные моменты времени в сечении на расстоянии 20 мм от начала заряда. Слева – реализованный метод Годунова, справа – программный комплекс ЭГИДА-2D.

Тестирование численного метода решения уравнений газовой динамики

Для проверки алгоритма и реализации численного метода решения уравнений газовой динамики было проведено сравнение с расчетами детонационного течения в программном комплексе ЭГИДА-2D [97]. Качественное сравнение представлено на рисунках 2.25 и 2.26.

Оба расчета проведены в схожей постановке: диаметр заряда 2 см, начальная плотность 1.6 г/см^3, скорость детонации 7 км/с, уравнение состояния продуктов взрыва – политропный газ с показателем адиабаты $\gamma = 3$. В постановке с использованием ЭГИДА-2Д нет учета противодавления атмосферы – продукты взрыва расширяются в вакуум. Это отличие проявляется в небольшом несоответствии расчетов на границе расширяющихся продуктов 2.26.

Сравнение расчетов подтверждает корректность реализации численного метода расчета структуры течения расширяющихся продуктов детонации.

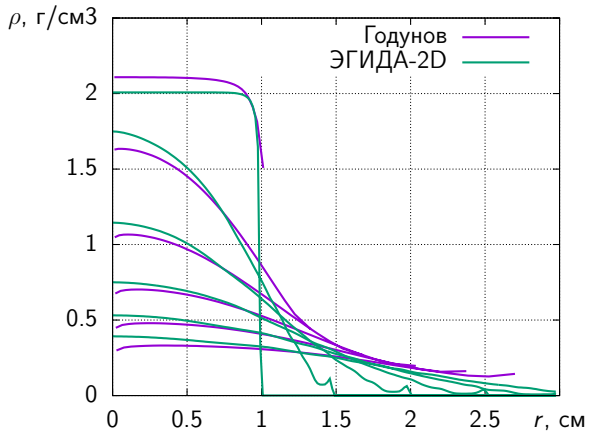


Рисунок 2.26 – Сравнение двух расчетов детонационного течения. Распределения плотности в разные моменты времени с шагом 1 мкс в сечении на расстоянии 20 мм от начала заряда.

2.2.4 Заключение

Разработано два эффективных метода восстановления газодинамических параметров детонационного течения: на основе подбора пространственного распределения давления и подбора параметров уравнения состояния продуктов взрыва. Оба метода позволяют построить согласованное с уравнениями газовой динамики решение. Рентгеновская тень от получаемого решения близка к измеренной в эксперименте. Оставив неизвестными ряд термодинамических параметров, таких как химический состав и температура, удается построить решение с газодинамическими параметрами, близкими к исследуемому. Можно назвать этот подход томографией газодинамических параметров детонационного течения.

Разработанный метод активно применяется для уточнения свойств известных взрывчатых веществ и определения характеристик новых составов [9, 13, 18, 22, 25, 28, 35].

2.3 Параметры детонационного течения и адиабаты разгрузки продуктов взрыва

2.3.1 Адиабата Пуассона и инварианты Римана

Простое баротропное уравнение состояния в виде зависимости давления только от плотности $\Pi(\rho)$ (2.10) фактически является адиабатой Пуассона, связывающим 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 10^7 Па. Температура при этом остается совершенно неизвестной. Восстанавливаются только согласованные механические параметры течения.

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

$$u(\rho) + \int_{\rho_J}^{\rho} \frac{c(\rho)}{\rho} d\rho = const = u_J, \tag{2.13}$$

где u – массовая скорость, $c(\rho)$ – зависимость скорости звука от плотности (2.11).

Описанная выше методика была использована для восстановления параметров Чепмена-Жуге, газодинамических характеристик детонационных течений и адиабат разгрузки для ряда взрывчатых составов.

Следует еще раз обратить внимание – методика позволяет восстановить зависимость давления от плотности только вдоль адиабаты разгрузки, можно проинтегрировать работу, совершаемую расширяющимися газами, и восстановить зависимость внутренней энергии от плотности, но температура остается за границами методики. Без дополнительных предположений о ней ничего сказать нельзя.

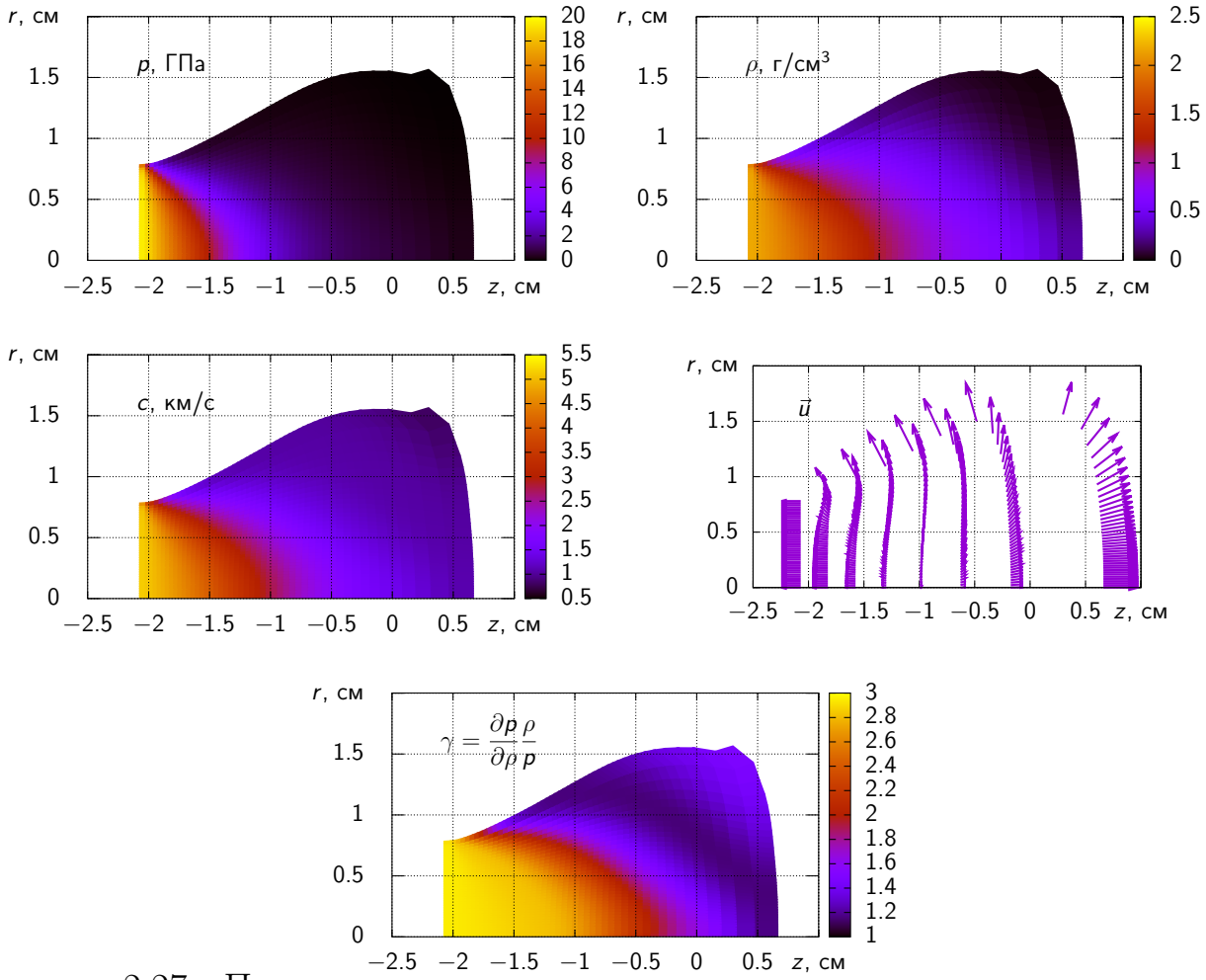


Рисунок 2.27 – Пространственные распределения газодинамических параметров при детонации заряда тротила на момент времени 3 мкс от момента инициирования: давление, плотность, скорость звука, вектор массовой скорости и дифференциальный показатель адиабаты.

2.3.2 Детонационные параметры тротила

Были исследованы заряды литого тротила (тринитротолуол): плотность 1.63 г/см^3, диаметр 16 мм, скорость детонации 6.8 км/с.

Структура течения продуктов детонации

Численно решая систему уравнений газовой динамики (2.2.3) с соответствующим уравнением состояния (2.10), были восстановлены распределения газодинамических параметров детонационного течения на момент времени 3 мкс от момента инициирования (рис. 2.27, 2.28).

Восстановленное газодинамическое течение выглядит разумно, но количественную оценку точности восстановленных параметров течения провести

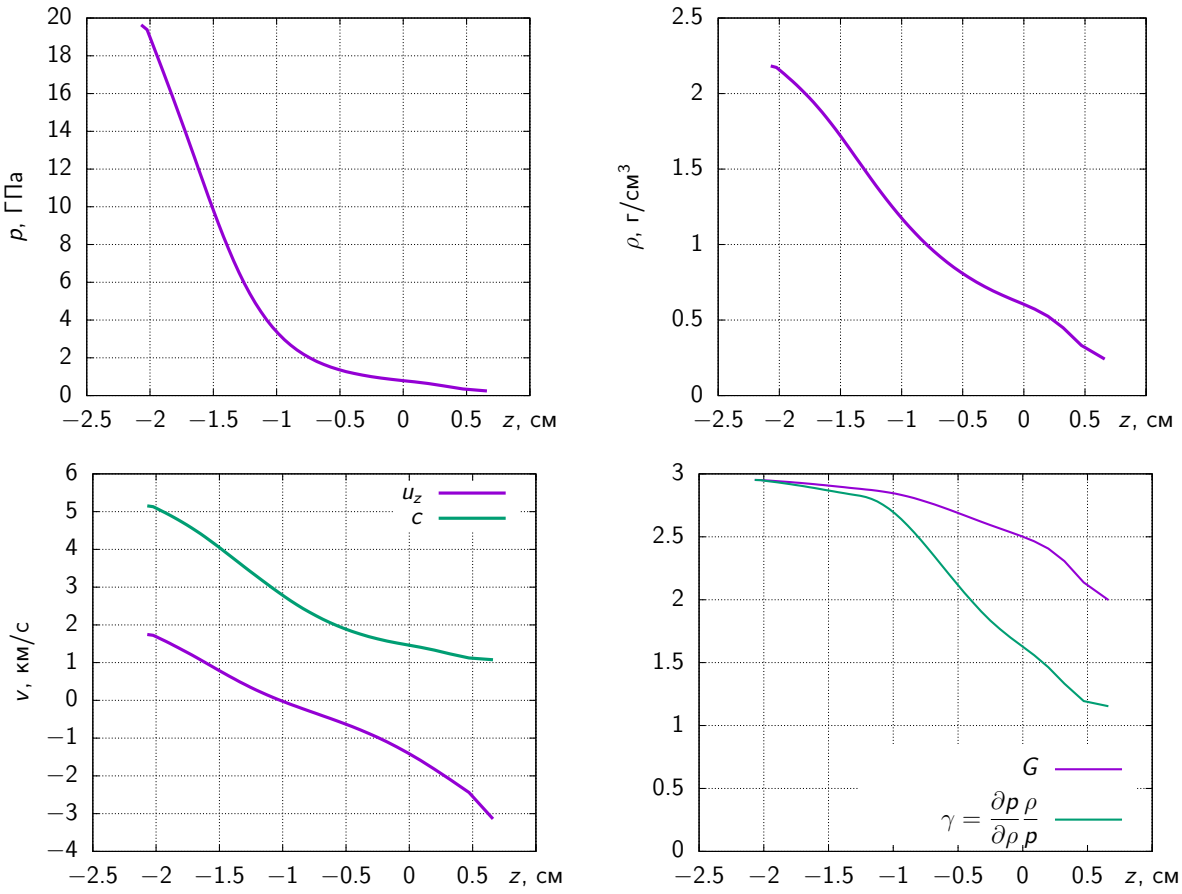


Рисунок 2.28 – Распределения газодинамических параметров на оси заряда при детонации заряда тротила на момент времени 3 мкс от момента инициирования: давление, плотность, скорость звука, продольная компонента вектор массовой скорости, показатель адиабаты и дифференциальный показатель адиабаты.

трудно.

Адиабата разгрузки

По соотношениям (2.10, 2.12, 2.13) были построены адиабаты разгрузки (рис. 2.29). 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 экспери-

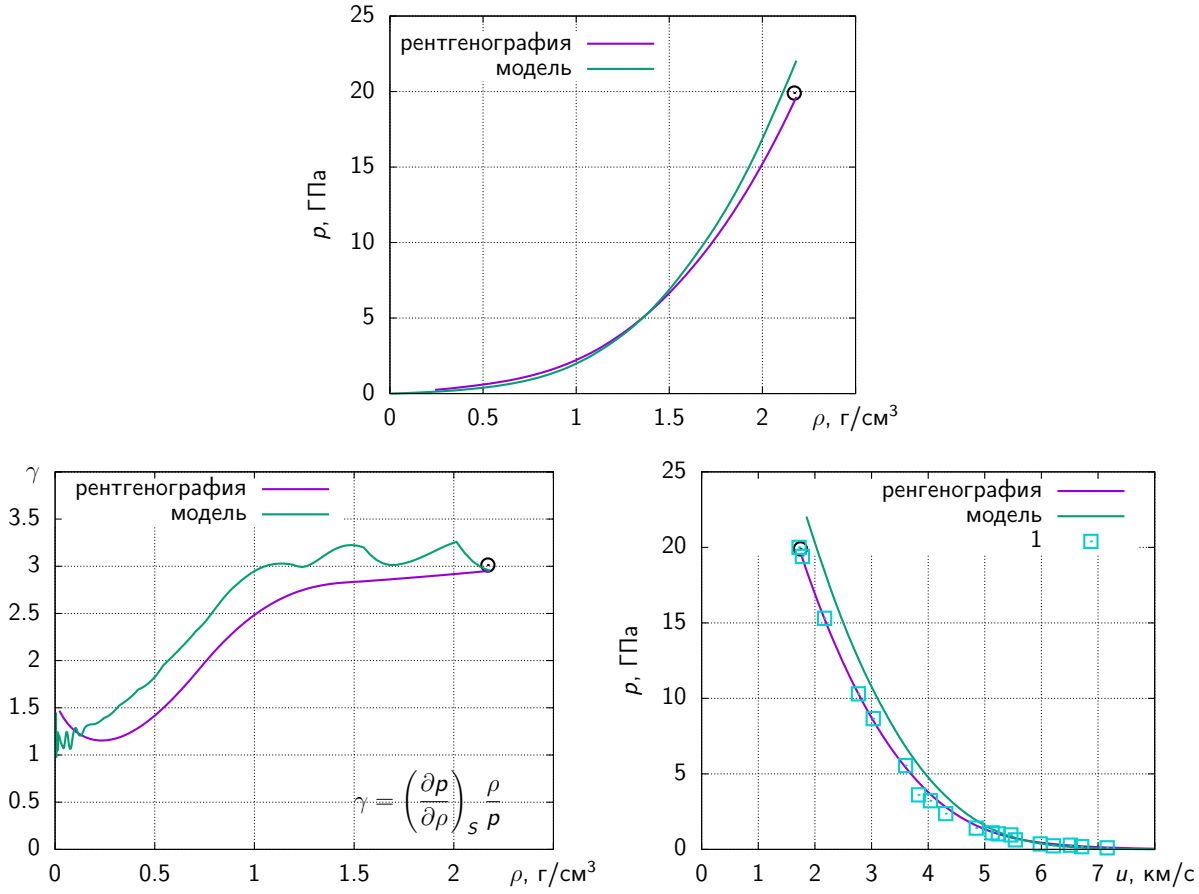


Рисунок 2.29 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации тротила: "рентгенография" – адиабата, восстановленная по данным рентгенографического эксперимента, "модель" – численная модель описанная далее, 1 – экспериментальные данные [98].

мента, хорошо соответствует экспериментальным данным [98] и модели. От параметров в точке Чепмена-Жуге (2 г/см^3, 20 ГПа) до 1 г/см^3 и 2 ГПа наблюдается стабилизация дифференциального показателя γ около 3, это хорошо соответствует часто используемому в физике взрыва приближения политропного газа. Для меньших плотностей и давлений наблюдается плавный переход к уравнению состояния разреженного газа с показателем адиабаты несколько большим единицы.

2.3.3 Детонационные параметры ТАТБ

Были исследованы заряды ТАТБ (триаминотринитробензол): плотность 1.8 г/см^3, диаметр 20 мм, скорость детонации 7.6 км/с.

Структура течения продуктов детонации

В ходе численного решения системы уравнений газовой динамики (2.2.3) с соответствующим уравнением состояния (2.10), были восстановлены распределения газодинамических параметров детонационного течения на момент времени 3 мкс от момента инициирования (рис. 2.30, 2.31).

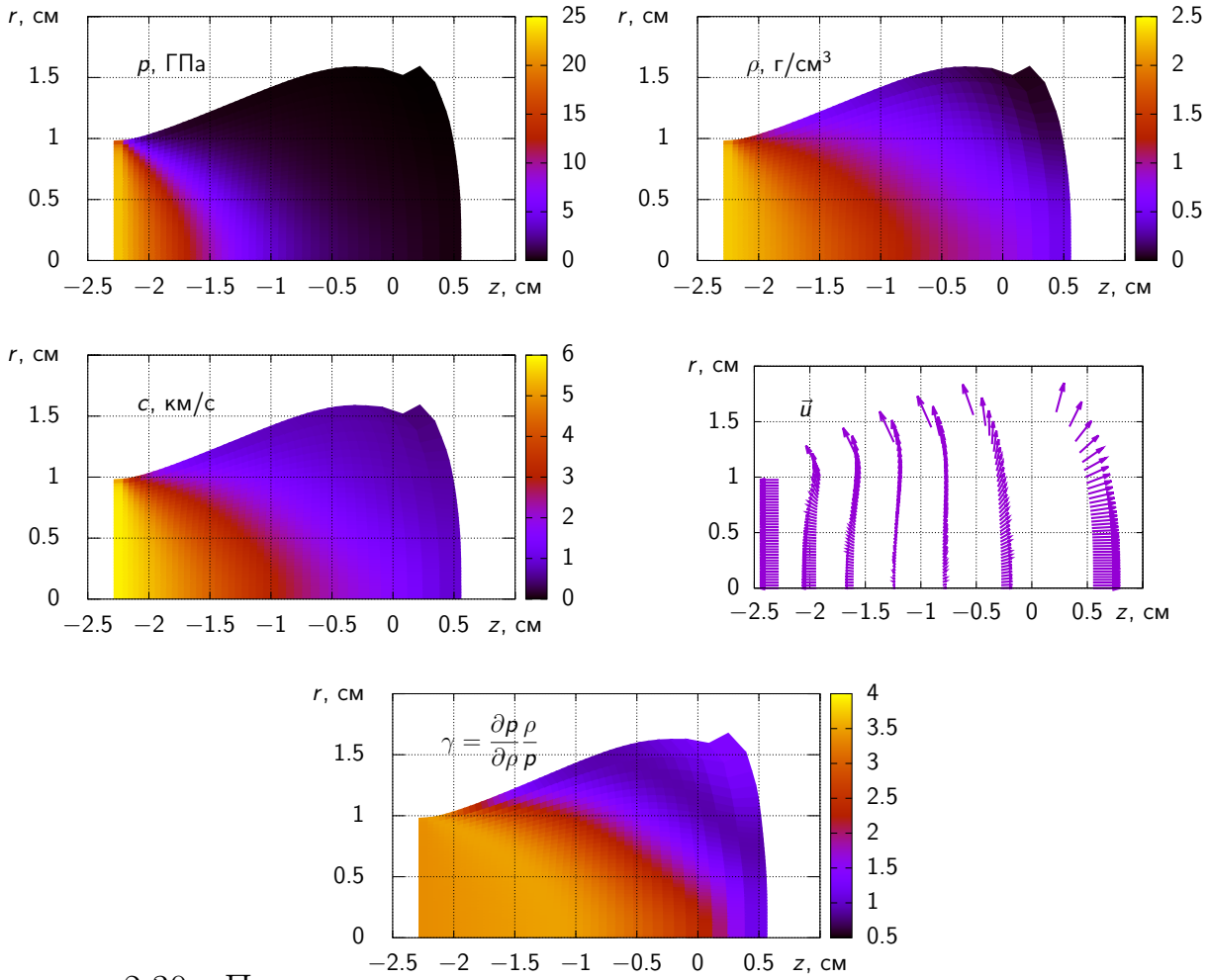


Рисунок 2.30 – Пространственные распределения газодинамических параметров при детонации заряда ТАТБ на момент времени 3 мкс от момента инициирования.

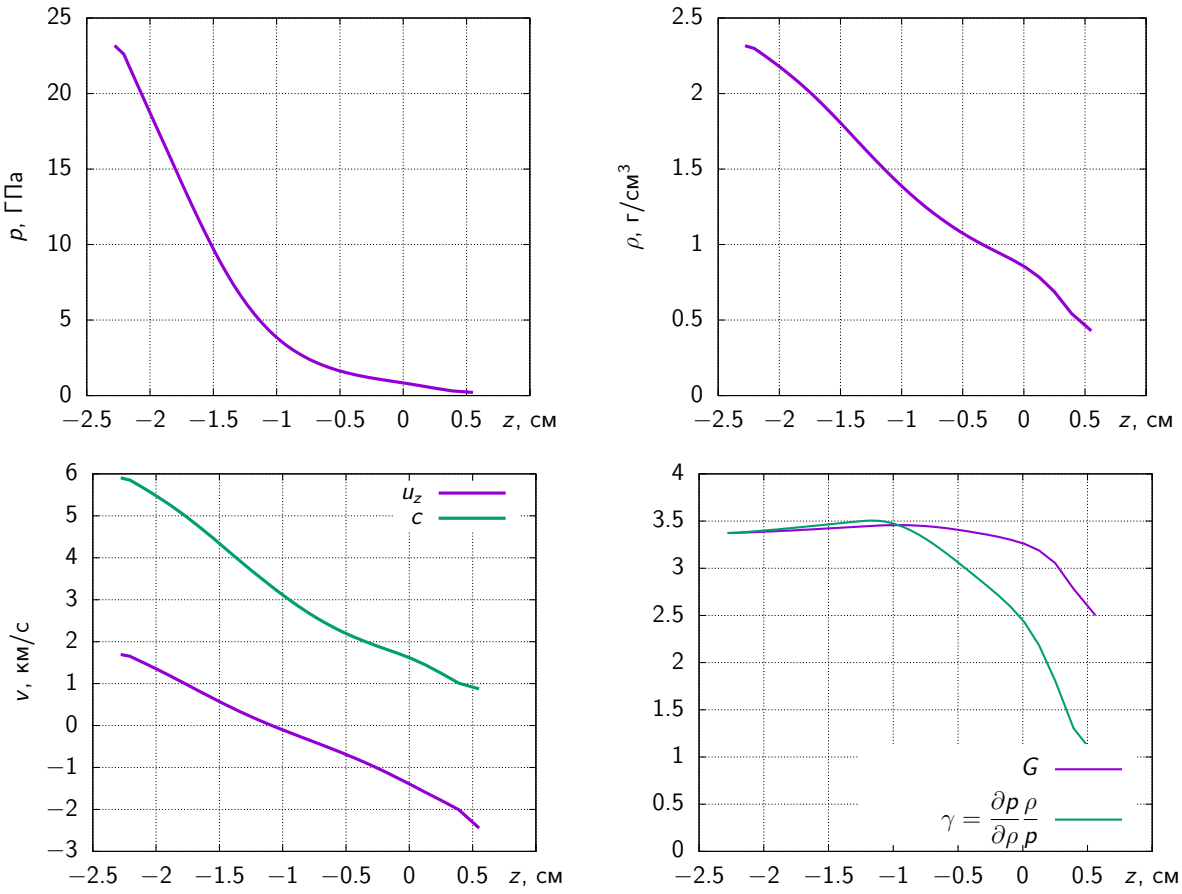


Рисунок 2.31 – Распределения газодинамических параметров на оси заряда при детонации заряда ТАТБ на момент времени 3 мкс от момента инициирования.

Адиабата разгрузки

По соотношениям (2.10, 2.12, 2.13) были построены адиабаты разгрузки продуктов детонации в координатах давление-плотность и давление-массовая скорость (рис. 2.32). Приведено сравнение с экспериментальными данными и моделью, описанной ниже.

Для состава ТАТБ рентгенографическая методика хорошо определила параметры детонации Чепмена-Жуге. Адиабаты разгрузки, восстановленные из рентгенографического эксперимента и модели, хорошо соответствуют друг другу. Для параметров свыше 1 г/см^3 и 2 ГПа наблюдается стабилизация дифференциального показателя γ около 3. Для меньших плотностей и давлений наблюдается плавный переход к уравнению состояния разреженного газа с показателем адиабаты около единицы.

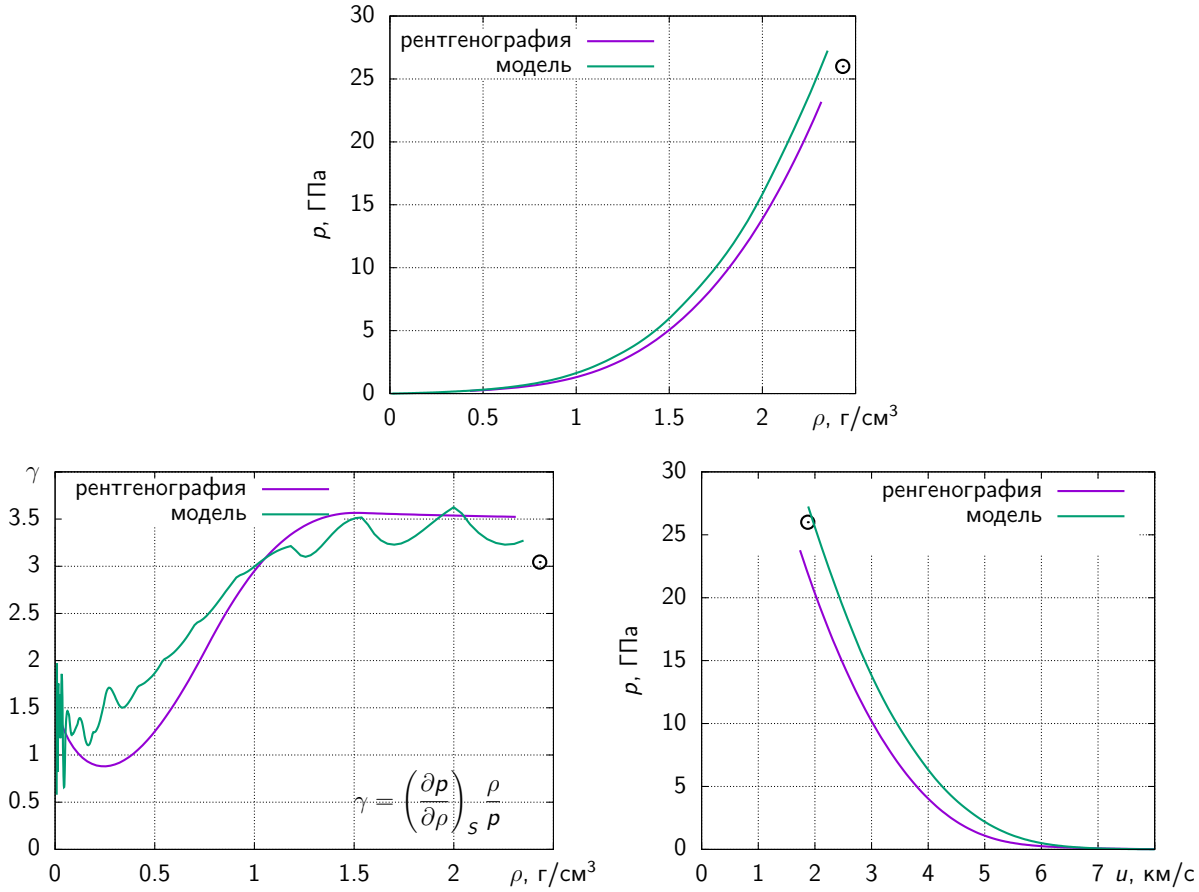


Рисунок 2.32 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации ТАТБ. "рентгенография" – адиабата, восстановленная по данным рентгенографического эксперимента, "модель" – численная модель, описанная далее, 1 – экспериментальные данные [99].

2.3.4 Детонационные параметры ГАВ

Были исследованы заряды ГАВ (гексанитрогексаазаизовюртцитан, HNIW, CL-20): плотность 1.9 г/см^3, диаметр 20 мм, скорость детонации 9.1 км/с.

Адиабата разгрузки

По соотношениям (2.10, 2.12, 2.13) были построены адиабаты разгрузки (рис. 2.33). Приведено сравнение с экспериментальными данными и моделью, описанной ниже.

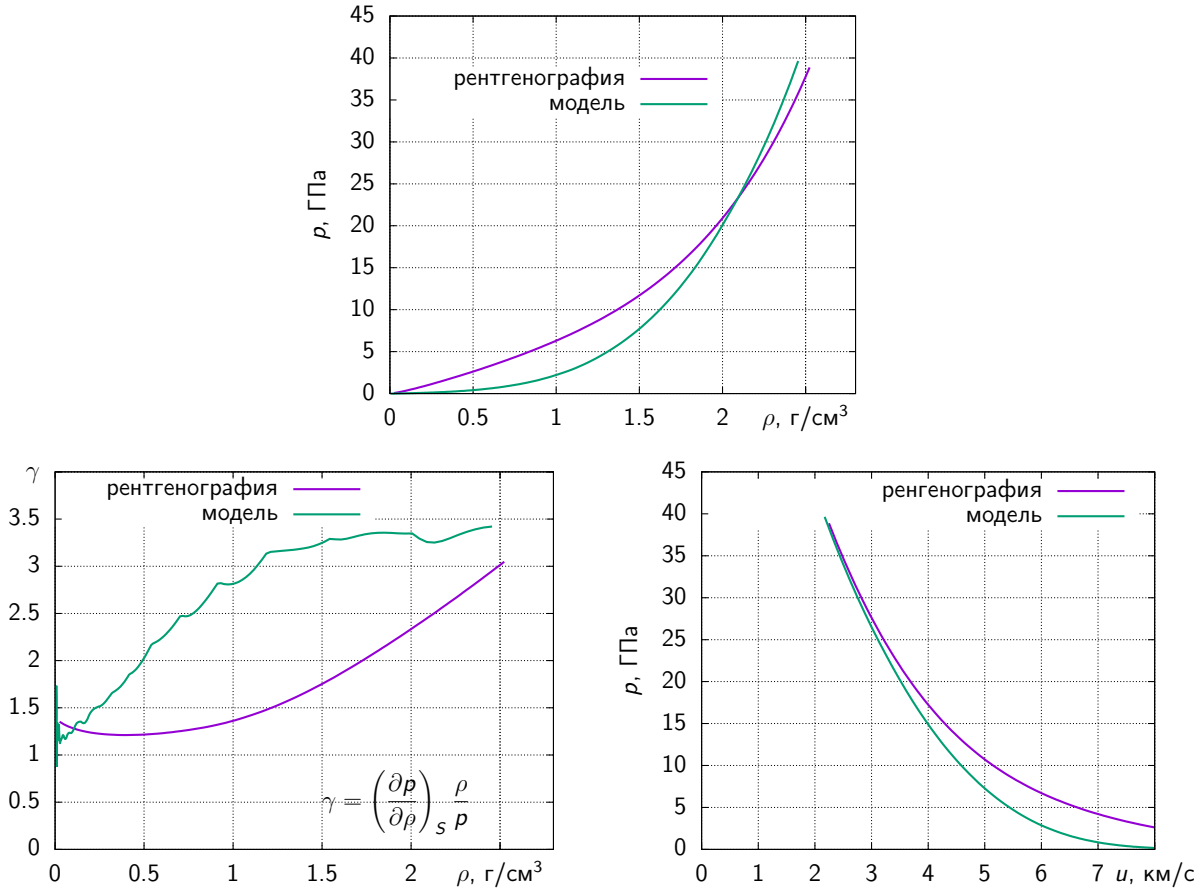


Рисунок 2.33 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации ГАВ. "рентгенография" – адиабата, восстановленная по данным рентгенографического эксперимента, "модель" – численная модель, описанная далее.

Для состава ГАВ, рентгенографическая методика хорошо определила параметры детонации Чепмена-Жуге, а адиабаты разгрузки, экспериментальная и вычисленная, удовлетворительно соответствуют друг другу.

2.3.5 Детонационные параметры БТФ

Были исследованы заряды БТФ (бензтрифуроксан): плотность 1.85 г/см^3, диаметр 20 мм, скорость детонации 8.6 км/с.

Адиабата разгрузки

По соотношениям (2.10, 2.12, 2.13) были построены адиабаты разгрузки (рис. 2.34). Приведено сравнение с экспериментальными данными и моделью, описанной ниже.

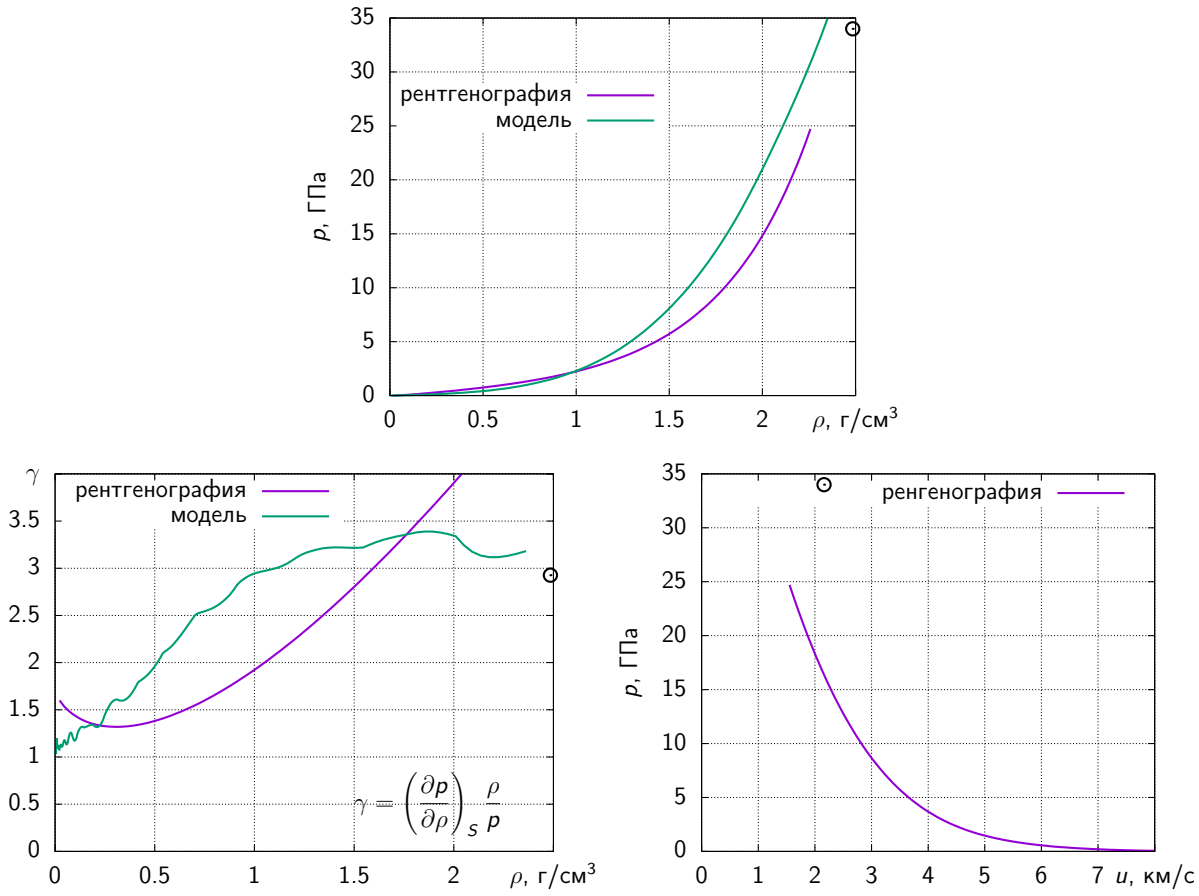


Рисунок 2.34 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации бтф. "рентгенография" – адиабата, восстановленная по данным рентгенографического эксперимента, "модель" – численная модель, описанная далее, 1 – экспериментальные данные [99].

Для состава БТФ, рентгенографическая методика плохо определила параметры детонации Чепмена-Жуге, а адиабаты разгрузки, экспериментальная и вычисленная, удовлетворительно соответствуют друг другу.

Приведенное расхождение демонстрирует основную ошибку методики. При поперечных рентгенографических измерениях очень важно время между кадрами съемки. На сегодняшний день это 124 нс. Момент прохождения детонационным фронтом исследуемого сечения не регулируется. Если в конкретном эксперименте момент съемки далеко отстоит от момента прохождения исследуемого сечения – методика регистрирует уже зону разлета и, соответственно, ослабленные параметры Чепмена-Жуге.

Заниженная плотность приводит к заниженному давлению и завышенно-

му значению G_J в точке Чепмена-Жуге. Для получения необходимого разлета, уравнение состояния компенсирует метательные свойства путем занижения зависимости $G(\rho)$. При недостатке данных вблизи условия Чепмена-Жуге, методике удается формально подобрать уравнение состояния, которое хорошо описывает всю остальную газодинамику исследуемого течения.

Анализа корректности и однозначности восстановления уравнения состояния по динамике рентгеновской тени не проводилось. Обоснованием метода являются хорошие результаты для случаев достаточного количества данных как вблизи Чепмена-Жуге, так и при значительном расширении продуктов взрыва.

2.3.6 Детонационные параметры гексогена

Восстанавливаемое по данным рентгенографии уравнение состояния продуктов детонации является универсальной характеристикой состава и может использоваться для моделирования течений зарядов других размеров и геометрий.

Для проверки универсальности полученного уравнения, были исследованы заряды на основе гексогена с разным диаметром. Полученные адиабаты представлены на рисунке 2.35.

Адиабата разгрузки

По соотношениям (2.10, 2.12, 2.13) были построены адиабаты разгрузки (рис. 2.35). Приведено сравнение с моделью, описанной ниже.

Адиабаты, полученные для зарядов разного диаметра, хорошо соответствуют друг другу. Это подтверждает важный вывод: методика позволяет определять уравнение состояния, пригодное для описания детонационного течения зарядов другой формы из того же состава.

Безусловно, вывод справедлив для зарядов с размерами, значительно превышающим критический диаметр детонации.

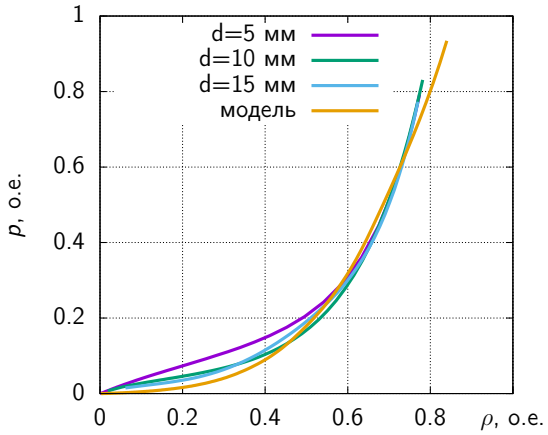


Рисунок 2.35 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации. "рентгенография" – адиабата, восстановленная по данным рентгенографического эксперимента для зарядов разного диаметра, "модель" – численная модель, описанная далее.

2.3.7 Заключение

Используя метод подбора параметров баротропного уравнения состояния продуктов детонации, были определены параметры Чепмена-Жуге и адиабаты разгрузки для широкого спектра взрывчатых составов. Проведено сравнение с данными других авторов и численной модели уравнения состояния.

Показано, что метод устойчиво работает, если данные по рентгеновской тени покрывают все течение: от Чепмена-Жуге до значительного расширения продуктов взрыва. Увеличить точность иногда удается путем набора статистики и построения уравнения состояния по данным нескольких экспериментов.

2.4 Заключение

Разработано семейство эффективных методов восстановления параметров детонационного течения для условий цилиндрической симметрии течения.

- Используя адаптированную сеточную аппроксимацию, удается восстановить распределение плотности в исследуемом сечении.

- Подбирая подходящее пространственное распределение давления, уда-

ется построить детонационное течение с газодинамическими параметрами, не отличимыми по рентгеновской тени от экспериментального.

- Подбирая подходящее уравнение состояния продуктов взрыва, удается найти детонационное течение с газодинамическими параметрами, не отличимыми по рентгеновской тени от экспериментального.

- Основная ошибка метода определяется недостаточным временным разрешением, приводящим к заниженным параметрам Чепмена-Жуге.

Глава 3

Модель уравнения состояния плотных реагирующих газов

В разделе 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. Для определения энтальпий и свободных энергий химических соединений используются табличные данные (В.П. Глушко, Д. Сталл).

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 K и до давлений 100 ГПа. Базовыми параметрами для заданных условий являются плотность, температура и химический элементный состав исследуемой смеси.

Уделено значительное внимание тестированию моделей.

3.1 Обзор уравнений состояния

3.1.1 Ключевые подходы

Даже если ограничиться уравнениями состояния продуктов взрыва, требования к ним будут очень разнообразными и даже противоречивыми. Любой обзор моделей будет субъективным и неполным. Представлю некоторые модели, безусловно имевшие или имеющие до настоящего времени практическое

значение, отражающие основные моменты развития подходов и сформировавшие современные тенденции.

Уравнения без химического состава

Первые простые уравнения состояния описывают исключительно адиабату расширения продуктов детонации вдоль изоэнтропы из точки Чепмена-Жуге.

В работе К.П. Станюковича (1945, Доклады академии наук, "Об изучении детонации конденсированных взрывчатых веществ") [100] предложена зависимость давления от плотности в виде

$$p(\rho) = p_J(\rho/\rho_J)^3.$$

Несмотря на исключительную простоту, модель позволяет получать разумные оценки газодинамических параметров детонационного течения и часто используется на практике для получения быстрых оценок.

Для описания общего уравнения состояния, описывающего не только изоэнтропу продуктов детонации, но и другие адиабаты, используются более сложные зависимости в виде калорических уравнений состояния, выражающих давление через плотность и внутреннюю энергию – модель В.Н. Зубарева (1969, Прикладная механика и техническая физика, "Изэнтропы расширения продуктов взрыва конденсированных ВВ") [101].

Холодная энергия E_c и холодное давление p_c выражаются через соотношения:

$$E_c(\rho) = ae^{-k/\rho} - b\rho^m + A[(\rho - \rho_J)^3 + B]e^{-a(\rho-\rho_J)^2},$$

$$p_c = -\frac{\partial E_c}{\partial V}.$$

Полное давление выражается через коэффициент Грюнайзена G –

$$p(E, V) = p_c + G\frac{(E - E_c)}{V}.$$

Коэффициент Грюнайзена в общем случае зависит от объема.

Температура явно не влияет на параметры уравнения; она является зависимым параметром и определяется из соотношения

$$T(V,E) = \frac{E - E_c(V)}{C_v}.$$

Уравнение состояния Зубарева имеет более десяти параметров. Это позволяет хорошо описать адиабату разгрузки конкретного состава, но функциональная зависимость не обоснована, и предсказательная сила модели очень слаба. Фактически, удается описать только известные данные.

Аналогичный подход разделения давления на холодную и тепловую части используется при построении уравнения состояния JWL (Jones-Wilkins-Lee) [92]. Уравнение JWL широко используется для проведения численного моделирования газодинамики течения продуктов взрыва, в том числе в коммерческих программных комплексах. Разработаны техники подбора параметров по экспериментальным данным, но для описания нового состава необходим характеризующий его набор экспериментальных данных. Проблема аналогичная – много параметров для описания конкретного состава, но слабая предсказательная сила при описании других составов.

Простой малопараметрической и универсальной модели с хорошей точностью нет и, по-видимому, не предвидится. Некоторый успех в этом направлении – уравнение состояния продуктов взрыва Куропатенко (1977 г). В работах ([102]) для описания продуктов взрыва предложен подход, основанный на единственной характеристике взрывчатого состава: зависимости скорости детонации от его исходной плотности. Такой подход требует задания всего двух констант: кристаллической плотности и соответствующей ей скорости детонации, но переносимости на другие составы нет.

Уравнения с химическим составом

В уравнении состояния Becker-Kistiakowsky-Wilson (1963, Detonation Properties of Condensed Explosives Computed Using the Becker-Kistiakowsky-Wilson Equation of State) [103] появляется химический состав и температура. Учет расталкивания молекул при большом сжатии происходит путем представления давления в виде вириального разложения по степеням обратного объема:

$$\frac{pV}{RT} = 1 + \frac{B}{V} + \frac{C}{V^2}.$$

При подборе параметров уравнения состояния для каждой химической компоненты удается описывать сложные составы. Модель хорошо калибруется, воспроизводит заложенные параметры детонационных течений и обладает некоторой предсказательной силой. На ее основе появились первые вычислительные комплексы [104, Ч. Мейдер], [105, Lawrence Livermore National Laboratory].

В ходе развитии модели оказалось, что не удается подобрать универсальные параметры вириального разложения для используемых химических компонент. Наилучшие коэффициенты оказываются разными при описании разных взрывчатых смесей. Необходим более фундаментальный учет межмолекулярных сил взаимодействия.

Уравнения с детальным химическим составом

Простой учет межмолекулярного взаимодействия в виде парного потенциала exp-6 позволил создать расширяемые модели с хорошей предсказательной силой [106, 1984 Зубарев]), [107, 1998 SANDIA]. Некоторые из них сегодня являются стандартом для проведения вычислений детонационных характеристик энергетических материалов [108, CHEETAH]. Успех подхода подтверждается экспортными ограничениями: возможность использовать программный комплекс CHEETAH имеют только лаборатории–резиденты США.

Методы классической молекулярной динамики

Описанные выше методы оперировали только центрами молекул, не учитывая ориентацию и структуру молекулы. Для следующего шага необходимо моделирование внутренней структуры и внутренних степеней свободы молекулы.

Один из таких потенциалов – Reactive Empirical Bond-Order (REBO). Модель REBO представляет собой функцию для расчета потенциальной энергии ковалентных связей и межатомных сил. В этой модели полная потенциальная энергия системы представляет собой сумму парных взаимодействий ближайших соседей, которые зависят не только от расстояния между атомами, но и от их локального атомного окружения. Параметризованная функция порядка связи используется для описания взаимодействий химических парных связей.

Метод позволяет учитывать "геометрию" молекул и рассчитывать параметры сложных смесей молекул взрывчатого вещества и продуктов реакции [109]. На данный момент это один из самых детальных подходов к построению уравнения состояния плотных реагирующих газов. Потенциально он позволяет добиться очень хорошей точности, но для определения параметров потенциала необходимы обширные экспериментальные данные. Часто возможности подхода избыточны.

Разработчики потенциала ReaxFF (Reactive Force Field) пошли дальше и разработали реакционно-способный потенциал, включающий в себя внутримолекулярные связи и динамическое образование новых связей. Подход позволяет учитывать формирование и разрушение химических связей, тем самым дает возможность моделировать кинетику протекания сложных химических реакций. Метод сложен в реализации и требует тяжелых компьютерных вычислений. На данный момент это предельные возможности подхода "грубой" классической механики для описания взаимодействия молекул и атомов.

Методы квантовой молекулярной динамики

Нет сомнений, что дальнейшее качественное развитие моделей уравнения состояния связано с развитием методов квантовой молекулярной динамики. Подходы, использующие методы функционала плотности (Density-Functional Theory), активно развиваются [110].

Особенно впечатляют достижения, недоступные подходам классической механики. Так, в работе [111] получены параметры уравнения состояния флюида CO и CO_2 в широком диапазоне давлений и температур с учетом важного эффекта полимеризации. Квантовый расчет ударной адиабаты монооксида углерода представлен в работе [112].

Несмотря на потенциальные возможности подхода, его применение для широкого круга задач пока является нерешенным, сложным вопросом.

3.1.2 Современное состояние

Модели уравнения состояния, появившись, калибруются, внедряются в расчетные методики и программные комплексы и существуют долго, несмотря на появление новых, более эффективных подходов. В то же время, наблюдается явная тенденция формирования программных комплексов, позволяющих в однообразном подходе описывать большой набор веществ в широком диапазоне условий. Примером может служить современная обзорная работа по уравнениям состояния известных специалистов Ломоносова И.В.и Фортова С.В. [113].

Нельзя не упомянуть программный комплекс для проведения расчетов с широкодиапазонным уравнением состояния для газов и конденсированных составов SESAME: The Los Alamos National Laboratory Equation of State Database [114].

Отметим обстоятельный обзор эмпирических методов расчета детонационных параметров простых и многокомпонентных составов (2020, "Специальное конструкторско–технологическое бюро "Технолог", "Эмпирические ме-

тоды расчета взрывчатых веществ и композиций") [115]. Акцент сделан на простоте использования методов при разработке новых составов.

Сравнительный анализ уравнений состояния продуктов детонации конденсированных взрывчатых веществ, наиболее часто используемых при решении задач о механическом действии взрыва, изложен в [116]. Внимание уделено эффективности применения в численных методах.

Упомянем также обзор современных программных комплексов, вычисляющих термодинамические параметры в широком диапазоне условий. Проведено сравнение моделей между собой и с экспериментальными данными детонационных параметров для широкого набора энергетических материалов [117].

Для построения уравнения состояния был выбран подход, основанный на моделировании небольшого количества молекул, взаимодействующих с парным потенциалом exp-6 в условиях заданной температуры и элементного состава. Энергия системы определяется прямым суммированием потенциальной энергии взаимодействующих пар и внутренних степеней свободы молекул. Давление определялось по теореме о вириале. Равновесный химический состав определялся методом реагирующего ансамбля (Reactive Montecarlo). Метод позволяет небольшим набором параметров описать равновесные смеси плотных реагирующих газов для широкого диапазона давлений и температур.

Большое внимание уделено калибровке модели. Для этого использовался широкий набор экспериментальных данных разных методик (рис. 3.1).

3.2 Уравнение состояния разреженных реагирующих газов

Для контроля предельного перехода к разреженным газам и для обоснования предположения формирования равновесного химического состава в продуктов детонации была реализована модель уравнения состояния разре-

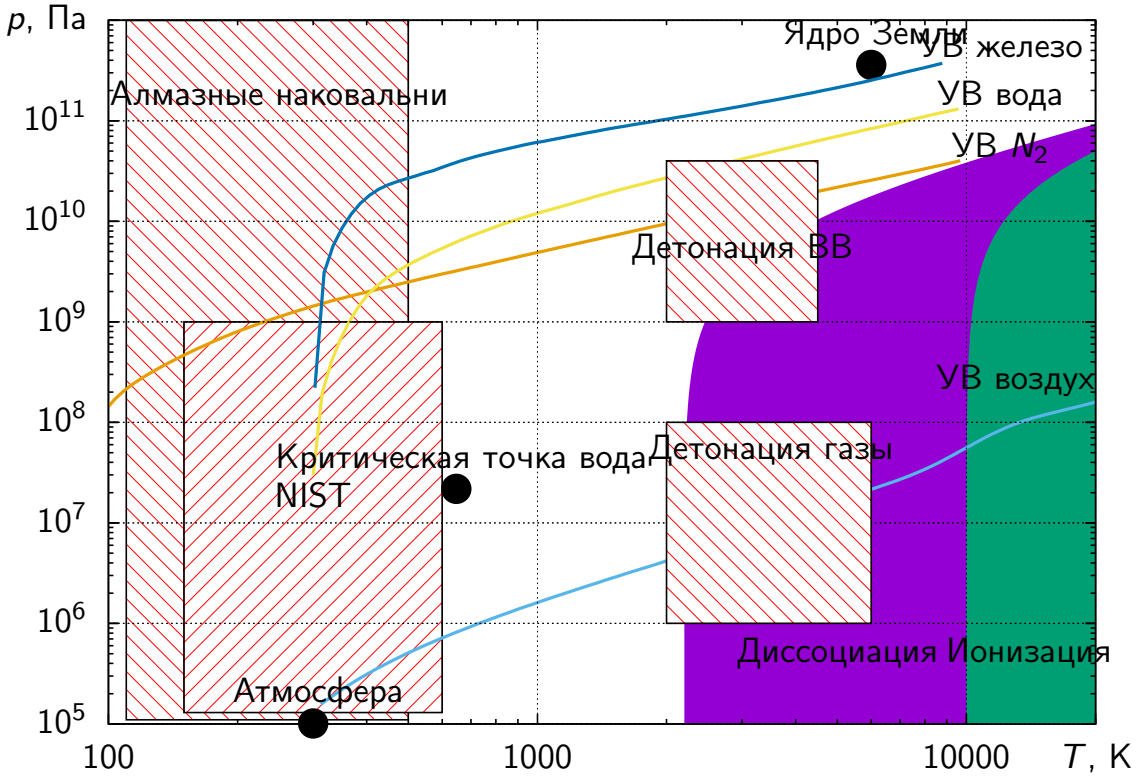


Рисунок 3.1 – Достижимые в эксперименте параметры для исследования уравнений состояния.

женных реагирующих газов.

3.2.1 Термодинамика одной химической компоненты

Рассмотрим натуральный логарифм статистической суммы $\ln(Z)$ газа невзаимодействующих неразличимых молекул (Больцмановский идеальный газ)

$$\ln(Z) = \ln \sum_n e^{-E_n/kT},$$

где суммирование ведется по всем энергетическим состояниям системы E_n, k – постоянная Больцмана. Используя неразличимость частиц, заменим сумму по всем состояниям системы из N частиц через сумму по энергетическим состояниям одной молекулы ε_k

$$\ln(Z) = \ln \left[\frac{1}{N!} \left(\sum_k e^{-\varepsilon_k/kT} \right)^N \right].$$

Или для больших N

$$\ln(Z) = N \ln \left[\frac{e}{N} \sum_k e^{-\varepsilon_k / kT} \right].$$

Энергию молекулы можно записать в виде

$$\varepsilon_k = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + \varepsilon'_k + \varepsilon^0,$$

где первое слагаемое – энергия поступательного движения, p_x, p_y, p_z – компоненты импульса, m – масса молекулы, ε'_k – энергии внутренних степеней свободы, а ε^0 – энергия формирования молекулы из базовых химических компонент при нуле градусов Кельвина.

Частично заменяя сумму на интеграл по фазовому объему, получаем следующее выражение

$$\ln(Z) = N \ln \left[e^{-\varepsilon^0 / kT} e \frac{V}{N} \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \sum_k e^{-\varepsilon'_k / kT} \right],$$

где V объем системы.

Введем давление $p_0 = 101325$ Па, соответствующее условиям стандартного состояния газов согласно [118] и перепишем выражение через давление p:

$$\ln(Z) = N \left[-\varepsilon^0 / kT + 1 + \ln \left(\frac{kT}{p_0} \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \sum_k e^{-\varepsilon'_k / kT} \right) + \ln \left(\frac{p_0}{p} \right) \right].$$

Используя подход работы [118], заменим среднее слагаемое на затабулированную функцию, зависящую только от температуры $f(T)$:

$$f(T) = \ln \left(\frac{kT}{p_0} \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \sum_k e^{-\varepsilon'_k / kT} \right), \tag{3.1}$$

$$\ln(Z) = N\left[-\varepsilon^0/kT + 1 + f(T) + \ln\left(\frac{p_0}{p}\right)\right],$$

или в переменных (T, V, N):

$$\ln(Z) = N\left[-\varepsilon^0/kT + 1 + f(T) + \ln\left(\frac{p_0 V}{NkT}\right)\right]. \tag{3.2}$$

Выражение для статистической суммы (3.2) является ключевым. Все остальные термодинамические параметры химической компоненты выражаются через него.

Выразим свободную энергию F, внутреннюю энергию E и энтальпию H через $\ln(Z)$ [119]:

$$F(T, V, N) = -kT\ln(Z),$$
$$E(T, V, N) = kT^2\left(\frac{\partial \ln(Z)}{\partial T}\right)_V,$$
$$H(T, V, N) = kT\left[\left(\frac{\partial \ln(Z)}{\partial \ln(V)}\right)_T + \left(\frac{\partial \ln(Z)}{\partial \ln(T)}\right)_V\right].$$

Или через затабулированную функцию $f(T)$. Для газов

$$F(T, V, \nu) = \nu\left[e_0^\nu - RT\left(1 + f(T) + \ln\left(\frac{p_0 V}{\nu RT}\right)\right)\right],$$
$$e^\nu(T) = e_0^\nu + RT^2\frac{\partial f(T)}{\partial T} - RT, \tag{3.3}$$
$$h^\nu(T, p) = e_0^\nu + RT^2\frac{\partial f(T)}{\partial T};$$

где e^ν и h^ν внутренняя энергия и энтальпия на моль вещества, e_0^ν это энергия формирования одного моля молекул из атомов при нуле градусов Кельвина.

Для конденсированных компонент:

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

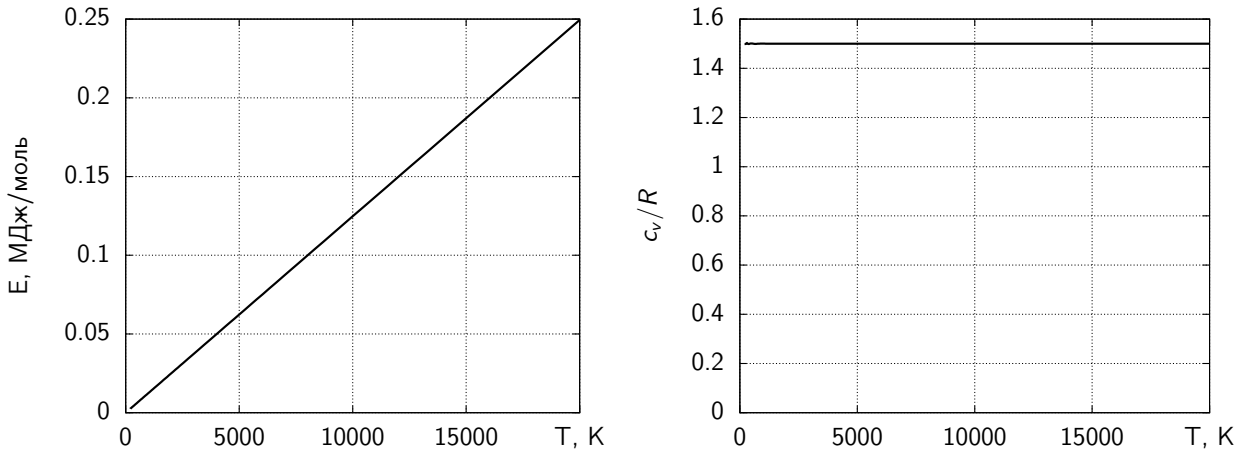


Рисунок 3.2 – Зависимости внутренней энергии и теплоемкости от температуры одного моля атомов He.

$$e^{\nu}(T) = e_0^{\nu} + RT^2\frac{\partial f(T)}{\partial T} - p_0\mu/\rho_0, \tag{3.4}$$

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

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

В качестве примера на рисунках 3.2, 3.3, 3.4 приведены зависимости внутренней энергии и теплоемкости ряда компонент.

Атом гелия представляет собой хороший пример системы без внутренних степеней свободы, в широком диапазоне температур его теплоемкость полностью определяется тремя поступательными степенями свободы и составляет $3/2R$ (рис. 3.2).

Молекула азота N_2 имеет много внутренних степеней свободы, и ее зависимость теплоемкости от температуры гораздо сложнее: при температурах до 500 K основной вклад дают три поступательных и две вращательных степени свободы ($c_v = 5/2R$), при больших температурах размораживаются колебания ($c_v = 7/2R$), при температурах больше 10 000 K появляются возбужденные электронные состояния (рис. 3.3).

Затабулированная зависимость внутренней энергии от температуры позволяет описать сложную зависимость теплоемкости от температуры и фазовый переход плавления для графита (рис. 3.4).

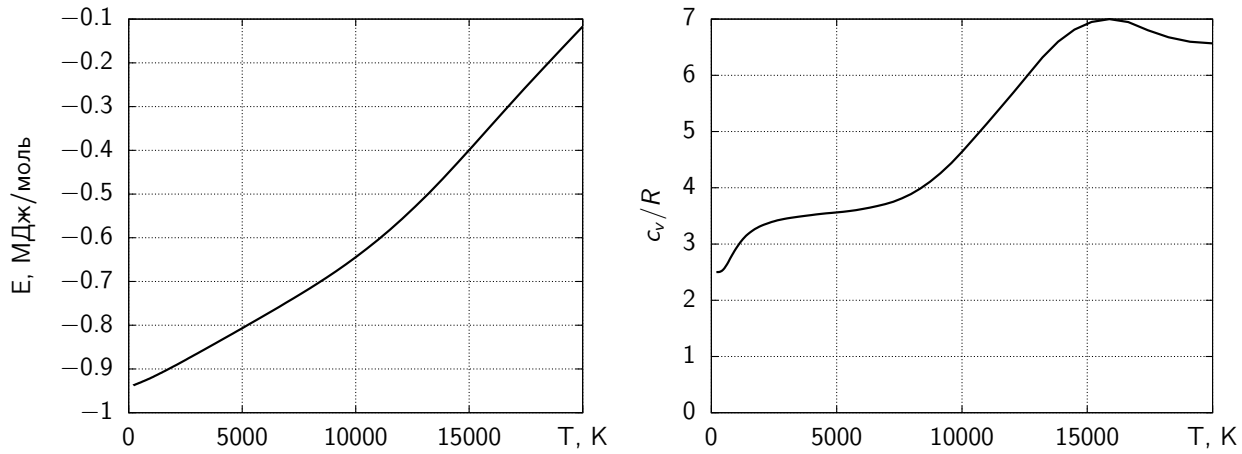


Рисунок 3.3 – Зависимости внутренней энергии и теплоемкости от температуры одного моля молекул N_2.

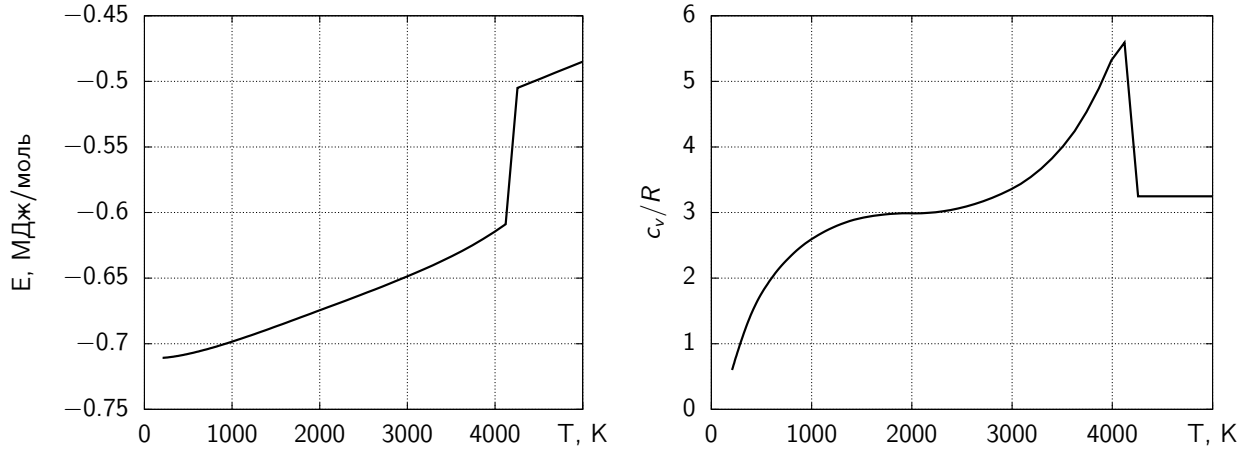


Рисунок 3.4 – Зависимости внутренней энергии и теплоемкости от температуры одного моля конденсированного углерода (графит).

Для определения термодинамических характеристик индивидуальных компонент использовались следующие источники. Для базовых, относительно несложных молекул, использовался многотомный справочник под редакцией Глушко В.П. [118], пополненный V и VI томами [120], в том числе его электронная версия [121, 122]. Для длинных углеводородов использовались данные из [123]. Современным местом, где активно аккумулируются термодинамические данные, является Национальный институт стандартов США [124].

Несмотря на разные стандарты представления термодинамических данных, для вычислений удалось использовать результаты разных литературных

источников. Реализованный алгоритм позволяет в однообразном подходе количественно описать термодинамические характеристики как газовых, так и конденсированных компонент.

3.2.2 Термодинамика смеси с замороженным химическим составом

Рассмотрим смесь с известным химическим составом из ν_i молей перемешанных газообразных и взвеси конденсированных компонент. Предполагая равновесие по температуре и давлению между компонентами, определим необходимые параметры. Масса смеси $M = \sum_i \nu_i \mu_i$, где суммирование проводится по всем компонентам. Полная плотность $\rho = M/V$. Объем, занимаемый газовыми компонентами $V_g = V - \sum_i \nu_i \mu_i / \rho_{0i}$, где суммирование проводится по конденсированным компонентам. Полное давление всех газовых компонент $p = \sum_i \nu_i RT/V_g$, где суммирование ведется по всем газовым компонентам.

Через приведенные выше соотношения выразим полную свободную энергию и приведенные на массу внутреннюю энергию и энтальпию:

$$F(T, V, \nu_1 ... \nu_k) = \sum_i F_i(T, V_g, \nu_i),$$

$$e(T, \nu_1 ... \nu_k) = \sum_i \nu_i e_i^{\nu}(T)/M,$$

$$h(T, p, \nu_1 ... \nu_k) = \sum_i \nu_i h_i^{\nu}(T, p)/M.$$

В качестве базовых параметров для задания состояния смеси выберем химический состав, плотность и температуру. Описанный алгоритм позволяет численно определить давление, внутреннюю энергию на единицу массы и частные производные по базовым параметрам:

$$e(T, \rho, \nu_1 ... \nu_k),\ p(T, \rho, \nu_1 ... \nu_k), \tag{3.5}$$

$$\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho,\ \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_T,\ \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho,\ \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T. \tag{3.6}$$

Все остальные термодинамические параметры вычисляются по следующим соотношениям:

$$c_v = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho, \tag{3.7}$$

$$c_p = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho + \left(p/\rho^2 - \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_T\right)\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho \Bigg/ \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T, \tag{3.8}$$

$$c_{sound} = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_S^{1/2} = \left[\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T \frac{c_p}{c_v}\right]^{1/2}, \tag{3.9}$$

$$\gamma = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_S \frac{\rho}{p} = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T \frac{c_p}{c_v}\frac{\rho}{p}, \tag{3.10}$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_S = \left(p/\rho^2 - \left(\frac{\partial E}{\partial \rho}\right)_T\right) / \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_\rho. \tag{3.11}$$

где c_v и c_p – теплоемкости, приведенные на единицу массы при постоянном объеме и давлении соответственно, c_{sound} – скорость звука, γ – показатель адиабаты.

3.2.3 Термодинамика реагирующей смеси

Для описания алгоритма поиска равновесного химического состава рассмотрим систему, в которой возможна одна прямая реакция диссоциации молекулы азота N_2 на два атома азота N ($1N_2 \to 2N$) и одна обратная синтеза молекулы N_2 из двух атомов N ($2N \to 1N_2$).

При фиксированной температуре, объеме и полном количестве молей атомов азота ν_0, термодинамическому равновесию соответствует минимум свободной энергии смеси:

$$F(T, V, \nu_{N_2}, \nu_N) = F_{N_2}(T, V, \nu_{N_2}) + F_N(T, V, \nu_N) = min,$$

$$\nu_N + 2\nu_{N_2} = \nu_0.$$

Для поиска минимума потенциала использовался численный алгоритм

итеративного улучшения химического состава. Из условий баланса количества компонент выбирался начальный химический состав (количество молей ν_{N_2} и ν_N): или произвольный, или из хорошего начального приближения от предыдущих вычислений. По выбранному составу вычислялось текущее значение F_0. Проводилось варьирование состава вдоль прямой реакции: $\nu'_{N2} = \nu_{N2} - \delta, \nu'_N = \nu_N + 2\delta$, где δ – уменьшение количества молей N_2. Для измененного состава вычислялось пробное значение $F' = F(N'_{N_2}, N'_N)$. Если пробное значение меньше текущего, пробный состав принимался за текущий и повторялось варьирование состава вдоль прямой реакции.

В противном случае проводилось варьирование состава вдоль обратной реакции: $\nu'_{N2} = \nu_{N2} + \delta, \nu'_N = \nu_N - 2\delta$. Для измененного состава вычислялось пробное значение $F' = F(\nu'_{N_2}, \nu'_N)$. Если пробное значение меньше текущего, пробный состав принимался за текущий и повторялось варьирование состава вдоль обратной реакции.

Если ни прямая реакция, ни обратная не уменьшали значения потенциала – шаг δ уменьшался и процедура повторялась.

Таким образом, на любой стадии алгоритма имелось приближенное решение, которое улучшалось до необходимой точности. Характерные относительные точности вычисления состава составляли 10^{-6}. Этого вполне достаточно для устойчивой работы всего алгоритма вычисления термодинамических параметров и для определения газодинамических характеристик моделируемого течения.

Описанный выше алгоритм устойчиво работает с газовыми и конденсированными фазами в широком диапазоне температур, позволяет сквозным образом формировать и удалять конденсированные компоненты. На рисунке 3.5 приведены равновесные химические составы смеси 2H + O (вода) при температуре 300, 3 000 и 20 000 K.

По аналогичному алгоритму реализована "реакция" формирования равновесных фаз паров и конденсированных компонент. Например в смеси есть

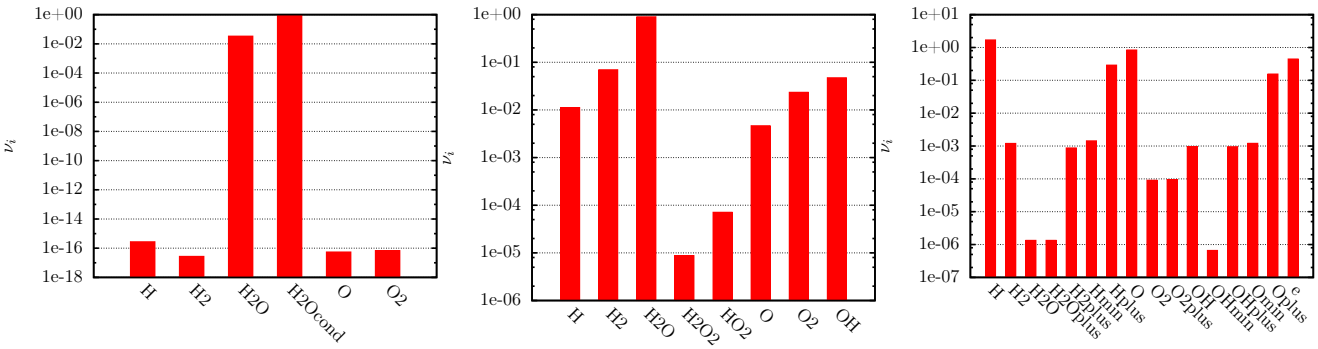


Рисунок 3.5 – Пример расчета равновесного химического состава смеси 2H + O (вода) при температуре 300, 3 000 и 20 000 K. Плотность 1.0 кг/м^3.

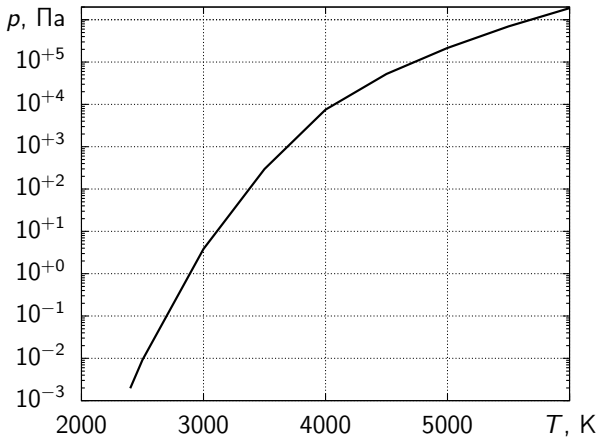


Рисунок 3.6 – Зависимость давления насыщенных паров углерода от температуры.

конденсированный углерод C_{cond} и газообразный C_{gase}. Между ними возможен обмен атомами. Это можно представить в виде реакции $1C_{cond} \leftrightarrow 1C_{gase}$. Минимизируя свободную энергию смеси, можно найти равновесное соотношение между фазами (рис. 3.6).

Для определения необходимых термодинамических величин использовались соотношения (3.5 – 3.10), но при вычислениях использовался равновесный химический состав.

В расчетах тестировалось две модели учета конденсированной фазы углерода: C_c – с возможностью формирования равновесной конденсированной фазой углерода и C_g – с запретом формирования конденсированного углерода. Из рисунка 3.6 видно, что давление насыщенных паров углерода мало во

всем диапазоне температур, реализующихся при детонации горючих газов. Пары углерода термодинамически очень невыгодны, и, как будет показано ниже, запрет формирования конденсированной фазы не приводит к существенному увеличению газообразного углерода. Его избыток соединяется с водородом и формирует простые углеводороды (CH_4, C_2H_2).

На графике (рис. 3.6) и далее за концентрацию газообразного углерода принималась суммарная концентрация полимеров углерода: C, C_2, C_3, C_4 и C_5.

3.2.4 Тестирование и сравнение с экспериментом

Построение ударной адиабаты

Для построения ударной адиабаты численно решалось нелинейное уравнение Гюгонио

$$(e - e_0) - \frac{p + p_0}{2}(1/\rho - 1/\rho_0) = 0.$$

При заданных начальных параметрах смеси (e_0, p_0 и ρ_0) интенсивность волны фиксировалась заданием температуры T. В уравнении Гюгонио остается один неизвестный параметр ρ, который находился численно. Реализация решения нелинейного уравнения взята из библиотеки численных методов на языке программирования C [78].

Примеры ударных адиабат сухого воздуха и метана представлены на рисунке (3.7), который демонстрирует устойчивость алгоритма при решении сложной нелинейной задачи.

Детонационные адиабаты разреженных газов

Для определения параметров детонации Чепмена-Жуге численно строилась ударная адиабата реагирующей смеси горючих газов (3.8, а). На ней находилась точка с условием $D = u + c$, где D – скорость фронта волны, u – массовая скорость вещества за фронтом, c – равновесная скорость звука. Пример соответствующих адиабат для смеси $2H_2 + O_2$ в координатах массовой скорости–удельный объем представлен на рис. 3.8, б.

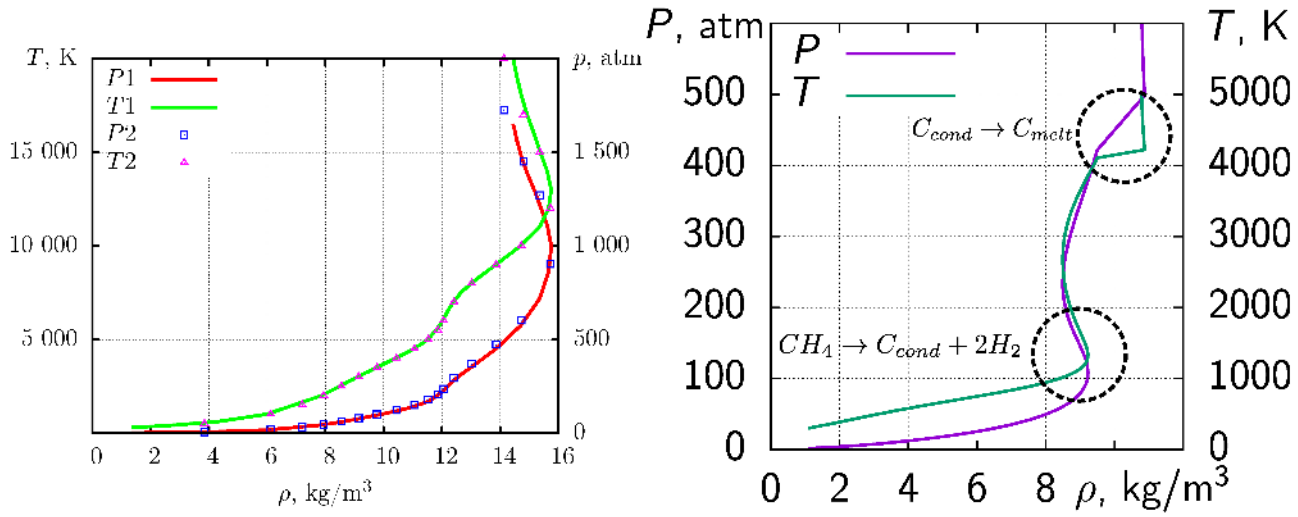
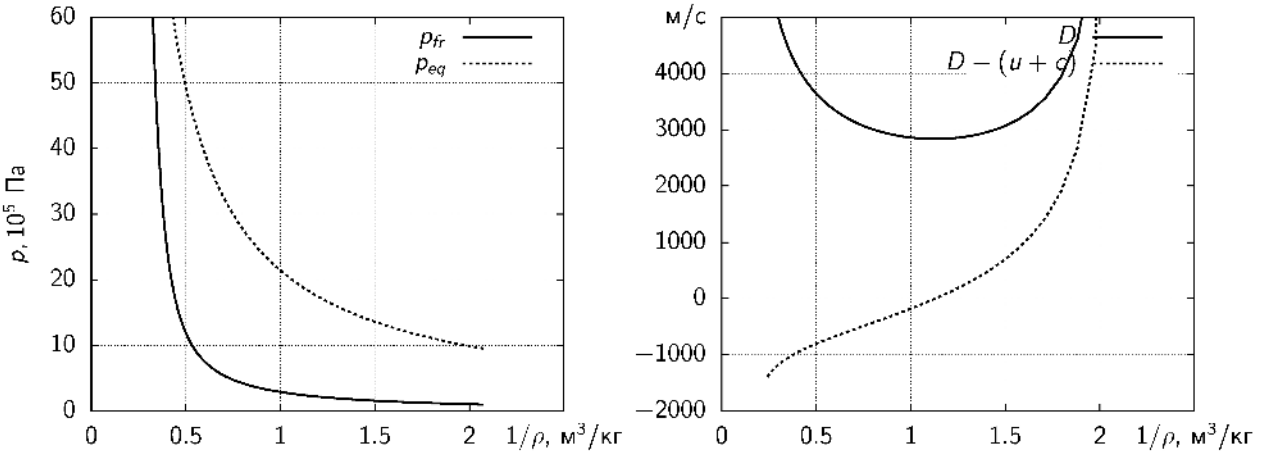


Рисунок 3.7 – Ударная адиабата сухого воздуха, состав: 0.78084 N_2, 0.20946 O_2, 0.00932 Ar, 0.0004 CO_2, $p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 298.15$ К. Ударная адиабата метана: $p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 298.15$ К.

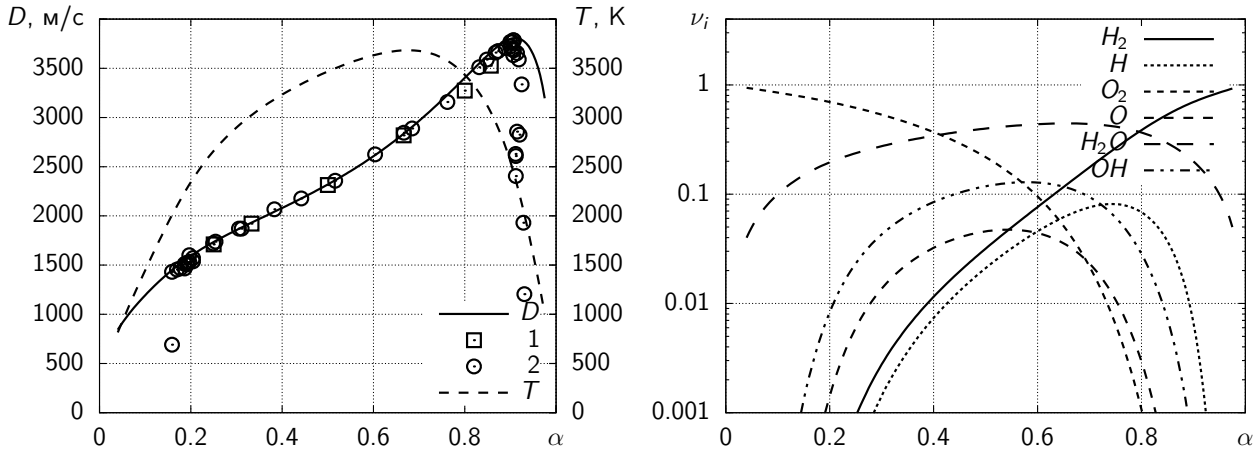


а б

Рисунок 3.8 – Пример расчета замороженной и реагирующей ударных адиабат смеси $2H_2 + O_2$ для начальных условий: $T_0 = 300$ К и $p_0 = 10^5$ Па. Приведены зависимости давлений (а) и скоростей (б) от удельного объема.

Из графиков (рис. 3.8) видно, что для определения точки Чепмена-Жуге на ударной адиабате может быть использован любой критерий: точка касания прямой Михельсона и детонационной адиабаты на плоскости давление объем, минимальная скорость фронта волны D и условие $D = u + c$. В данной работе для простоты реализации численного алгоритма для определения параметров детонации использовался последний критерий.

Для тестирования модели было проведено сравнение рассчитанных и экс-



а б

Рисунок 3.9 – Параметры детонации Чепмена-Жуге смеси на основе H_2 (водорода). Скорость волны и температура (а): 1 – [125], 2 – [126]. Химический состав (б).

периментальных скоростей детонации смесей α молей топлива и $(1-\alpha)O_2$ окислителя. Начальные условия для всех составов: температура смеси 298.15 K, давление 10^5 Па.

На всех представленных графиках линии соответствуют расчету по модели, а символами отмечены экспериментальные данные. Индексом C_c отмечены расчеты с возможностью формирования равновесных паров углерода и конденсированной фазы. Индексом C_g отмечены расчеты с запрещенным формированием конденсированной фазы углерода.

Смеси на основе H_2 (водород) (рис. 3.9). Расчеты скорости детонационной волны хорошо соответствуют экспериментальным измерениям в широком диапазоне концентраций топлива, за исключением концентрационных пределов.

Смеси на основе CH_4 (метан) (рис. 3.10). Расчеты скорости детонационной волны хорошо соответствуют экспериментальным измерениям в широком диапазоне концентраций топлива, за исключением концентрационных пределов. В области существования детонационных режимов равновесные пары углерода и конденсированная фаза не образуются.

Смеси на основе C_2H_2 (ацетилен) (рис. 3.11). При доле топлива в смеси

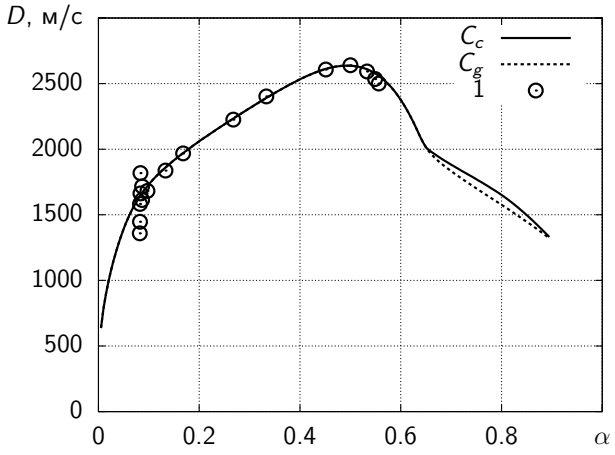


Рисунок 3.10 – Скорость детонации смеси на основе CH_4 (метан): 1 – [127].

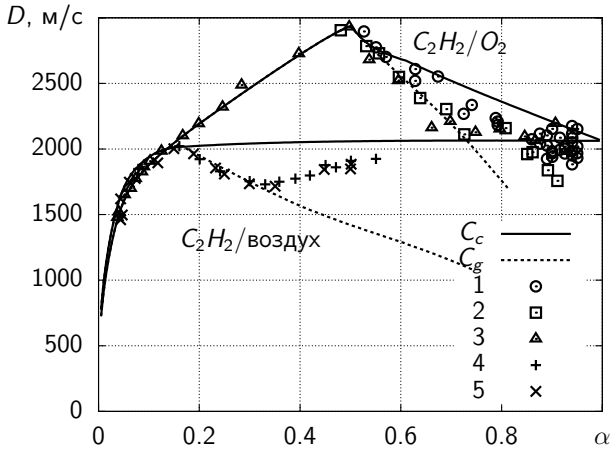
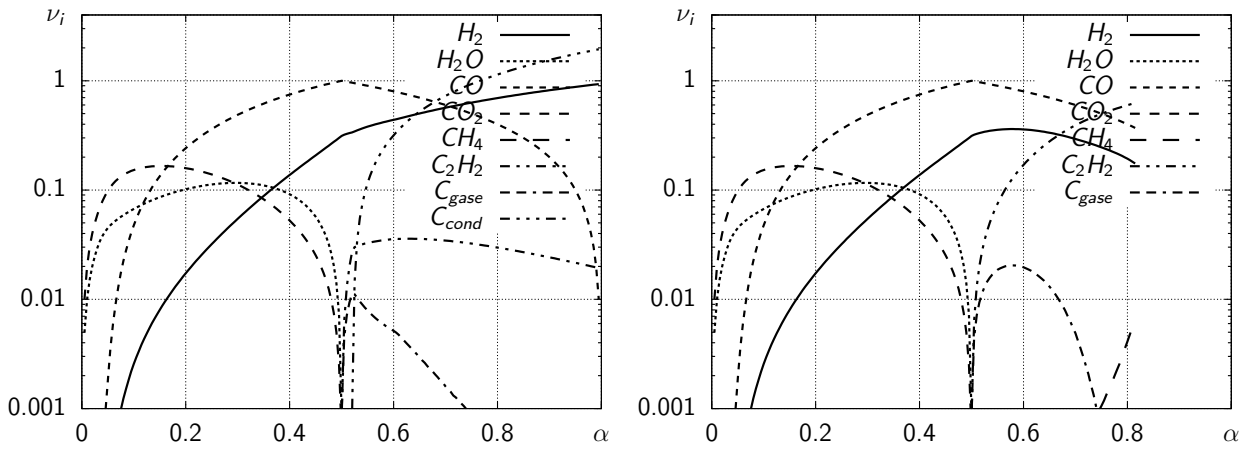


Рисунок 3.11 – Скорость детонации Чепмена-Жуге смеси на основе C_2H_2 (ацетилен) с кислородом: 1 – [128, 129], 2 – [130], 3 – [131]; с воздухом: 4 – [132], 5 – [131].



а б

Рисунок 3.12 – Химический состав в точке Чепмена-Жуге для смеси на основе C_2H_2 (ацетилен): а – модель C_c, б – модель C_g.

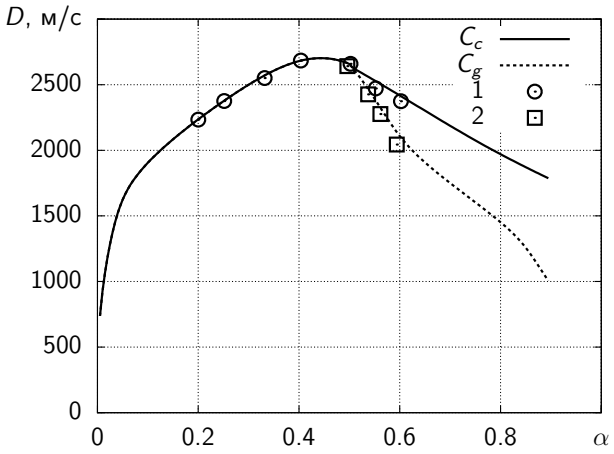


Рисунок 3.13 – Скорость детонации смеси на основе C_2H_4 (этилен): 1 – [132], 2 – [130].

более 0.5 выделяется существенное количество конденсированного углерода (рис. 3.12, а). При запрете формирования конденсированной фаза пары углерода термодинамически невыгодны. В продуктах реакции остается исходный ацетилен (рис. 3.12, б).

Ацетилен уверенно детонирует при значительном недостатке кислорода. Для смесей на его основе удается провести хорошее тестирование моделей с формированием равновесного конденсированного углерода и с запретом. Обе модели не дают точного соответствия эксперименту и задают лишь рамки детонационных параметров. Модель с запретом формирования конденсированного углерода несколько лучше описывает экспериментальные данные.

Формулировка более комплексной модели, учитывающей частичную конденсацию углерода, улучшит описание экспериментальных данных по ацетилену, но это представляется преждевременным. Фактически только смеси ацетилена детонируют в условиях формирования значительного количества конденсированного углерода. Для других горючих газов концентрационные пределы детонации не позволяют исследовать активное формирование конденсированного углерода.

Смеси на основе C_2H_4 (этилена) (рис. 3.13). При доле топлива в смеси более 0.5 выделяется существенное количество конденсированного углерода.

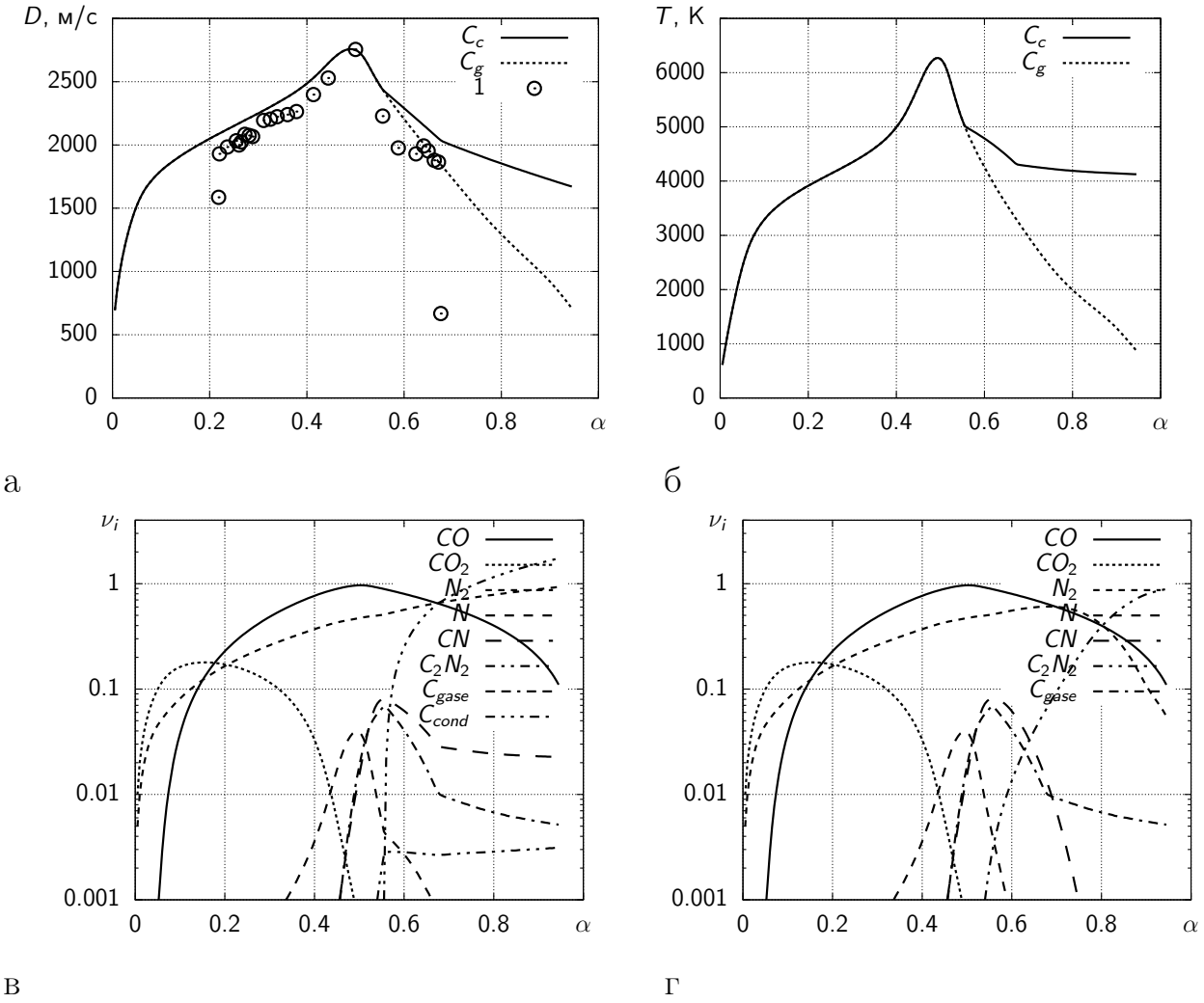


Рисунок 3.14 – Параметры детонации Чепмена-Жуге смеси на основе C_2N_2 (дициан). Скорость волны (а): 1 – [133]. Температура (б). Химический состав: в – модель C_c, г – модель C_g.

При запрете формирования конденсированной фазы пары углерода термодинамически невыгодны. В продуктах реакции формируется много ацетилена и метана. Модель с запретом формирования конденсированного углерода несколько лучше описывает зависимость скорости детонации от доли топлива в исходной смеси.

Смеси на основе C_2N_2 (дициан) (рис. 3.14). В составе смеси отсутствует водород. Это приводит к рекордным температурам детонации, до 6 000 K, и отсутствию химических соединений, способных связать газообразный углерод. Даже при таких условиях доля газообразного углерода невелика и составляет менее 5% от всего углерода в смеси.

В силу отмеченных особенностей, детонационные характеристики горючей смеси на основе дициана могли бы прояснить механизм конденсации углерода в продуктах взрыва. К сожалению, ошибка соответствия моделей и эксперимента не дает возможности отдать предпочтение какой-либо модели.

Таким образом, проведенное тестирование алгоритма путем сравнения рассчитанных и экспериментальных скоростей детонации для широкого набора топливо-кислородных смесей (H_2, CH_4, C_2H_2, C_2H_4, C_3H_6, C_4H_{10}, C_5H_{12}, C_2N_2). Показано хорошее согласие при избытке кислорода и отсутствии в продуктах взрыва конденсированного углерода.

Для большинства углеводородных топлив концентрационный предел не позволяет рассматривать стационарные детонационные режимы со значительным выделением конденсированного углерода. Исключение составили смеси на основе ацетилена, устойчиво детонирующие при недостатке кислорода, для которых обе модели плохо описывают экспериментальные данные. Для лучшего описания требуется комбинированная модель с учетом частичного формирования конденсированной фазы углерода и дополнительные экспериментальные данные.

3.2.5 Программный комплекс термодинамических расчетов для разреженных газов

Используя методы статистической физики, построена модель уравнения состояния реагирующей смеси разреженных газов и газовзвеси конденсированных компонент. Для определения детального равновесного химического состава рассматривается NVT ансамбль и численно находится минимум свободной энергии смеси из всех возможных компонент. Зная химический состав, давление вычисляется по уравнению состояния идеального газа, а внутренняя энергия по табличным зависимостям, зависящим только от температуры.

На основе описанного алгоритма разработан программный комплекс в виде библиотеки на языке программирования C++ и утилит с веб интерфейсом (http://ancient.hydro.nsc.ru/chem), позволяющий проводить онлайн расчеты

термодинамических параметров реагирующих газов и ряда простых газодинамических течений, в том числе детонационных волн.

Возможности программного комплекса.

- Вычисление равновесного химического состава смеси газов на основе элементов He, Ne, Ar, Kr, Xe, H, C, N, O, Na, Mg, Al, Si, S, Fe в широком диапазоне температур. Для ряда компонент в промежутке от 200 до 20 000 K.

- Вычисление ряда термодинамических параметров при заданной температуре и плотности смеси: равновесный химический состав, давление, энтальпия, внутренняя энергия, теплоемкость, показатель адиабаты равновесный и замороженный.

- Решение уравнения Гюгонио и построение равновесных и замороженных ударных адиабат.

- Определение термодинамических параметров горения при постоянном объеме или давлении.

- Определение параметров стационарных детонационных волн.

- Учтена возможность формирования конденсированных фаз C (графит), H_2O, Na, Na_2O, Mg, MgO, Al, Al_2O_3, S, SiO_2, Si, Fe, FeO, Fe_2O_3, Fe_3O_4, FeS, FeS_2.

Программный комплекс успешно используется для проведения научных расчетов, оптимизации горючих смесей в технологических процессах и для анализа задач взрыво- пожаро- безопасности. В рамках работы по договору "Оценка склонности руд и вмещающих пород к самовозгоранию и взрывчатости при условиях работы на глубинах более 1500 м" совместно с Институтом горного дела СО РАН, был проведен анализ взрывобезопасности взвесей сульфидных руд в атмосфере воздуха [36]. Были выработаны рекомендации для предприятий г. Норильска.

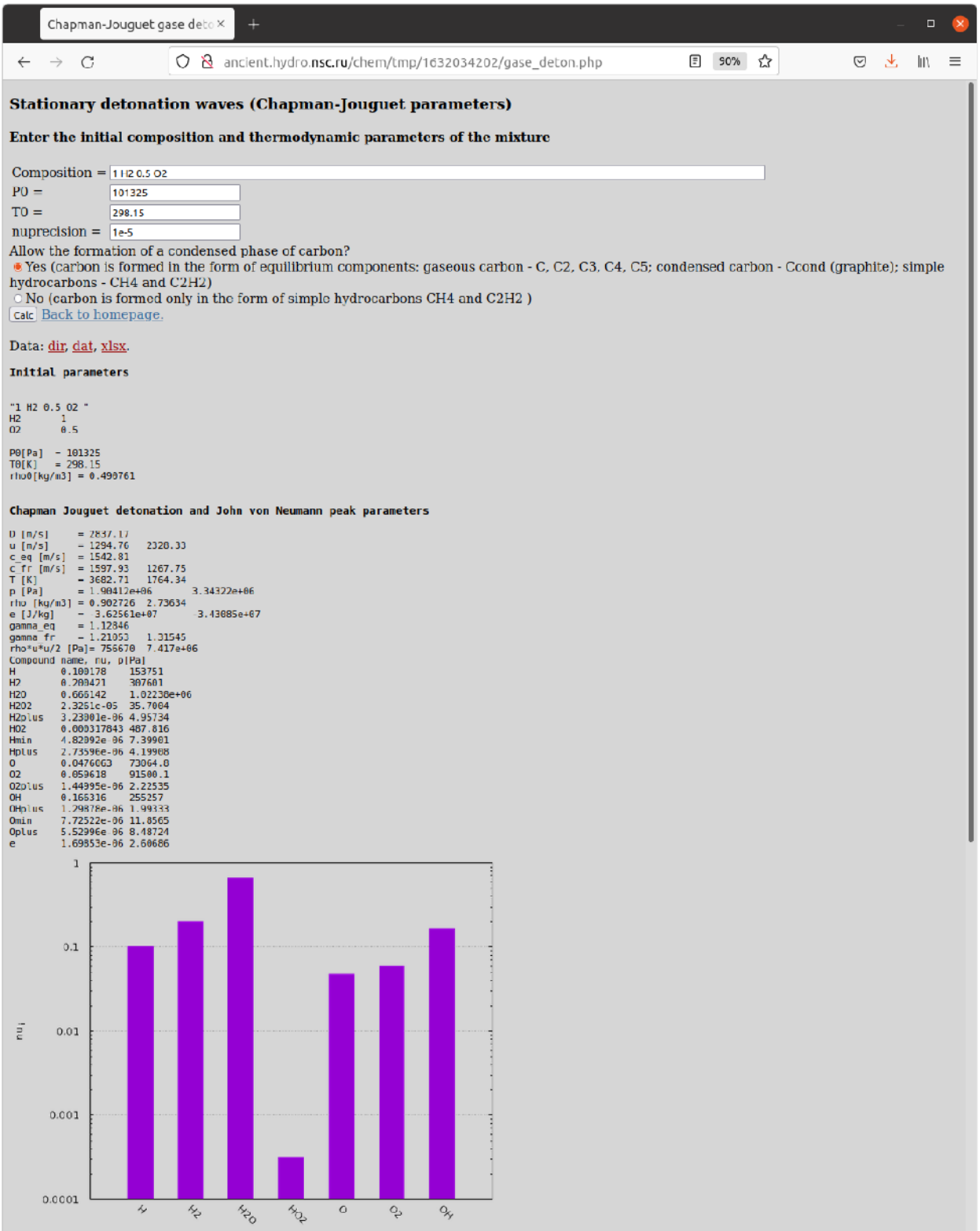


Рисунок 3.15 – Результат выдачи параметров детонации в точке Чепмена-Жуге и в пике фон Неймана.

На разработанный программный комплекс получено свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ [134].

Программный комплекс разработан при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 075-15-2020-781). Результаты проведенных с его помощью вычислений использовались для оптимизации горючей смеси для газодетонационного порошкового напыления.

3.2.6 Заключение

Разработана модель уравнения состояния разреженных реагирующих газов и создан программный комплекс, позволяющий проводить термодинамические и газодинамические вычисления в предположении формирования равновесного химического состава.

Научная новизна подхода заключается в реализации возможности проводить вычисления с широким списком горючих газов и газовзвесей. Проведено тестирование численного алгоритма.

Сравнение с многочисленными экспериментальными данными по зависимостям скорости детонации от химического состава смеси показало, что предположение о формировании равновесного химического состава хорошо описывает широкий круг ударных и детонационных явлений.

Результаты работы, подтверждающие основные положения, представлены в работе [37].

3.3 Уравнение состояния плотных реагирующих газов

3.3.1 Термодинамические параметры плотного газа взаимодействующих молекул

Для определения давления и внутренней энергии плотного газа взаимодействующих молекул с известных 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:

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

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

где r модуль расстояния; ε, b и α параметры потенциала взаимодействия между двумя рассматриваемыми молекулами. Как было показано в работах [135], потенциал exp-6 хорошо описывает детонационные и ударно-волновые процессы до давлений 50 ГПа.

Параметры потенциала exp-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 (рис. 3.16), 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 [136].

Потенциалы exp-6 и Леннард-Джонса схожи в области межмолекулярных расстояний вблизи положения равновесия. Можно показать, что при выборе параметров потенциалов в соотношении $\varepsilon = \varepsilon_{LJ}$, $b = 1.22 b_{LJ}$ для расстояний $r/b > 1$ потенциалы близки (рис. 3.17, а).

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 exp-6 для

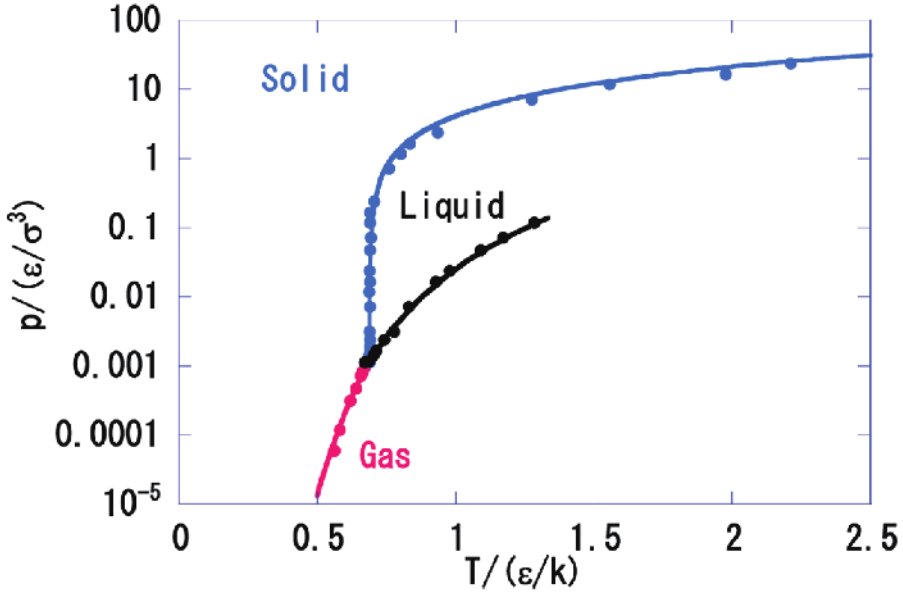


Рисунок 3.16 – Фазовая диаграмма системы частиц, взаимодействующих с потенциалом Леннард-Джонса из [137]. Параметры в критической точке: $kT_c/\varepsilon_{LJ} = 1.326$, $\rho_c b_{LJ}^3/m = 0.316$, $p_c b_{LJ}^3/\varepsilon = 0.111$ из [136].

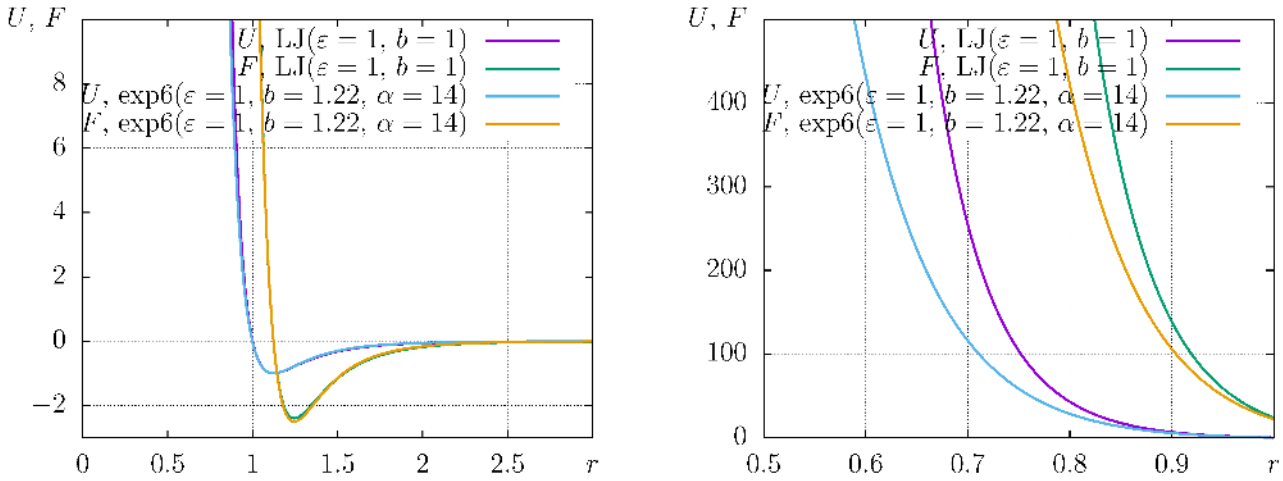


Рисунок 3.17 – Сравнение потенциалов Леннард-Джонса и exp6.

молекул одного вида.

Параметр потенциала α в основном влияет на уравнение состояния при больших сжатиях, для межатомных расстояний r/b меньше 0.75 (рис. 3.17, б). 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:

$$pV = NkT - 1/6 \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i}^{N'} r_{ij} F(r_{ij}), \tag{3.12}$$

$$E = 1/2 \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i}^{N'} U(r_{ij}) + \sum_{i=1}^{N} N_i / N_A e_i^{\nu}(T). \tag{3.13}$$

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 $(1 \ldots N)$, 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 [138].

Как показала практика использования метода, для получения разумной точности вычисления давления и внутренней энергии достаточно рассмотреть ансамбль из 50–100 молекул. Используя соотношения (3.12, 3.13), проводилось усреднение по времени для достижения необходимой точности.

Значение параметров потенциала для используемых в модели компонент приведено в приложении А.

3.3.2 Определение равновесного химического состава

Описание метода реагирующих частиц

По аналогии с работами [139–141], для определения равновесного химического состава воспользуемся методом ансамбля реагирующих частиц (Reactive Monte Carlo). Суть метода заключается в рассмотрении последовательности возможных химических составов исследуемой смеси, определении вероятностей их существования и усреднении необходимых термодинамических характеристик смеси.

Опишем метод подробнее.

Рассмотрим механику 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) (3.3) и статистический вес q зависят только от температуры. Полная энергия системы E вычисляется по (3.13).

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

$$\sim \prod_i \left(q_i^{N_i} / N_i! \right) e^{-E/kT}, \tag{3.14}$$

где $q_i = V \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \sum_k e^{-\varepsilon'_k/kT}$ вычисляется через (3.1).

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;

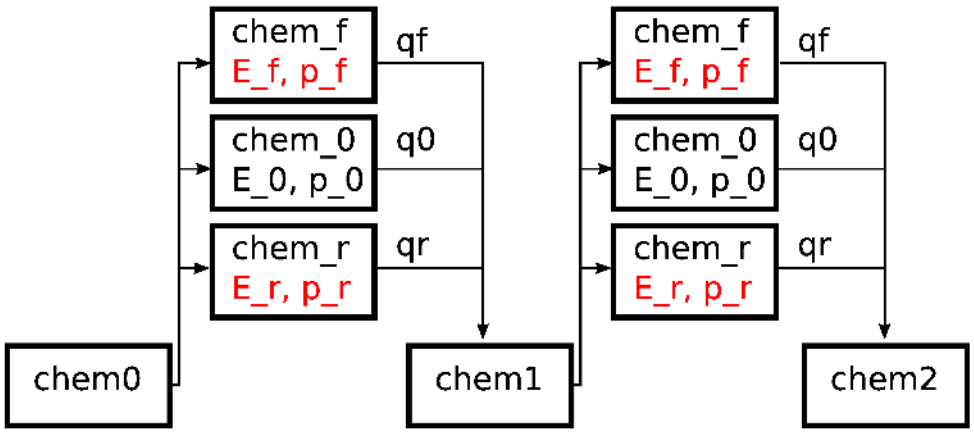


Рисунок 3.18 – Алгоритм построения последовательности тестируемых химических составов.

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;

$$w_0 = \frac{{q_A}^{N_A}}{N_A!}\frac{{q_B}^{N_B}}{N_B!}e^{\frac{-E_0}{kT}}, \tag{3.15}$$

$$w_f = \frac{{q_A}^{N_A+a}}{(N_A+a)!}\frac{{q_B}^{N_B+b}}{(N_B+b)!}e^{\frac{E_f}{kT}}, \tag{3.16}$$

$$w_r = \frac{{q_A}^{N_A-a}}{(N_A-a)!}\frac{{q_B}^{N_B-b}}{(N_B-b)!}e^{\frac{-E_r}{kT}}. \tag{3.17}$$

Для определения каждой вероятности задавался соответствующий химический состав в моделируемом ансамбле молекул. По (3.13) 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. Алгоритм схематично представлен на рисунке (рис. 3.18).

Для реакций с более сложным балансом соотношения (3.15, 3.16, 3.17) и вычислительный алгоритм понятным образом модифицируется.

Для описания энергетики взрывных течений можно рассмотреть относительно ограниченный набор химических компонент: O_2, O, H_2, H, N_2, N, NO, CO, CO_2, H_2O, OH, CH_4, NH_3. Как будет показано, он адекватно описывает широкий круг ударных волн и детонационных течений.

В описанном подходе базовыми являются зависимости давления p и 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 $\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T$, $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho$, $\left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_T$, $\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho$.

Остальные характеристики вычисляются по термодинамическим соотношениям:

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

$$c_p = c_v + \left(\frac{p}{\rho^2} - \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_T\right)\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho \Big/ \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T,$$

$$c_{sound} = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_S^{1/2} = \left(\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T \frac{c_p}{c_v}\right)^{1/2}, \tag{3.18}$$

$$\gamma = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_S \frac{\rho}{p} = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T \frac{c_p}{c_v}\frac{\rho}{p},$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_S = \left(p/\rho^2 - \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_T\right) \Big/ \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho. \tag{3.19}$$

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 примера на рисунке 3.19 приведены параметры равновесной смеси из компонент O и O_2.

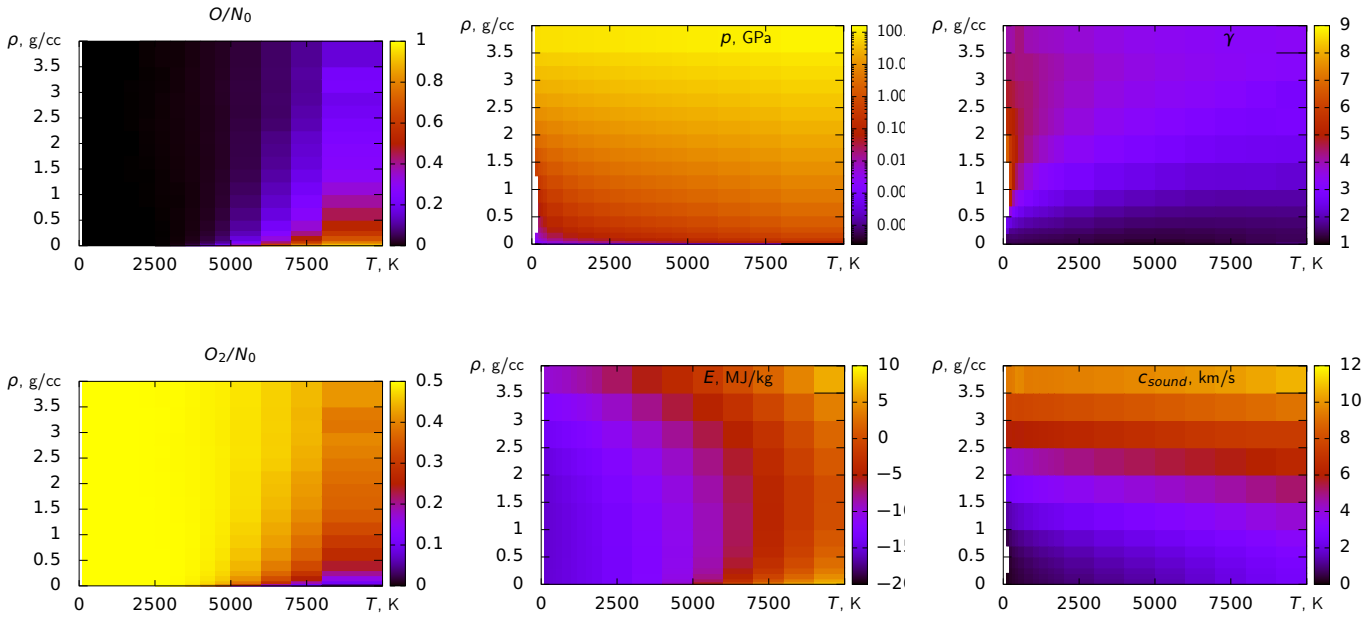
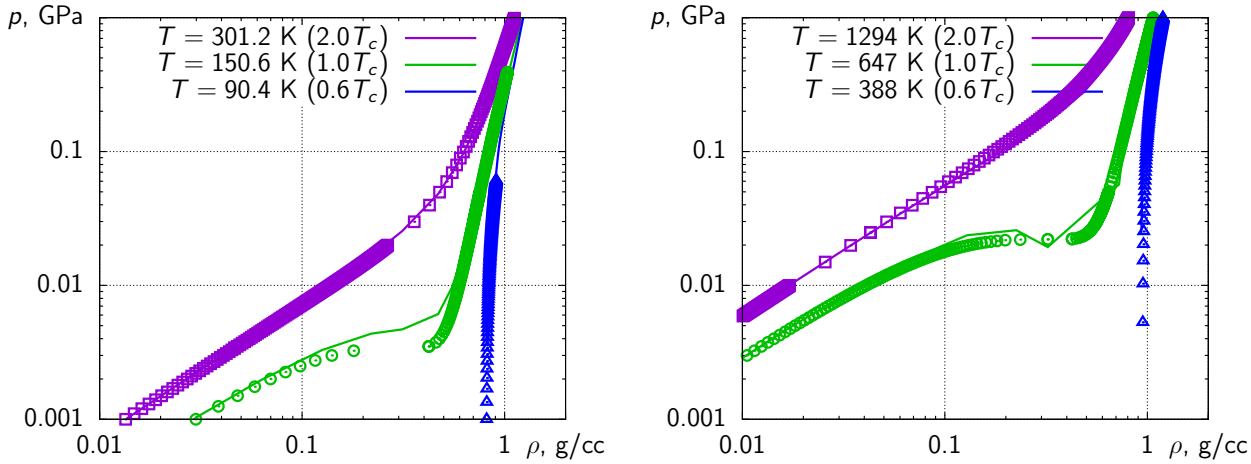


Рисунок 3.19 – Термодинамические параметры смеси из O и O_2 на плоскости плотность, температура: доля атомов O, давление, показатель адиабаты γ, доля молекул $O2$, внутренняя энергия смеси, скорость звука равновесная.

Методика ускорения вычисления параметров уравнения состояния

Вычисление равновесного химического состава при заданной плотности и температуре требует значительных вычислительных затрат – около одного часа. Для ускорения вычислений, для исследуемого элементного состава смеси на плоскости плотность–температура строилась двумерная сеточная функция базовых термодинамических параметров: равновесный химический состав, давление и полная внутренняя энергия на единицу массы.

Исследуемая область температур и плотностей покрывалась ортогональной сеткой, координаты узлов которой являлись элементами геометрической прогрессии с коэффициентом 1.3. При вычислении значения функции и ее частных производных, для произвольной температуры и плотности использовались данные 16ти опорных узлов – пресечений ближайших четырех строк с ближайшими четырьмя столбцами. При этом либо использовались запомненные значения из обработанных узлов, либо обрабатывались и запоминались значения из новых необработанных узлов. Таким образом, по необходимости



а) б)

Рисунок 3.20 – Изотермы в координатах давление-плотность: а – азота (N_2), б – H_2O. Сплошные линии – вычисление по модели, символы – данные Института стандартов США [124].

пространство покрывалось исследованными квадратами 4 на 4 узла, в пределах средней части которого вычисление термодинамических параметров происходило быстро по интерполяционным соотношениям.

Для этого по четырем точкам строились соответствующие полиномы 3й степени. Использование полиномов 3й степени позволило без разрыва интерполировать значение функции и ее первых частных производных.

3.3.3 Подбор параметров и тестирование модели

Калибровка по данным института стандартов США

Для ряда химических компонент было проведено сравнение модели с данными Института стандартов США [124]. 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. 3.20). Для компонент Ar, Ne, He, Kr, O_2, H_2, N_2, CO, CO_2, H_2O, CH_4, NH_3 удается подобрать параметры потенциалов молекулярного взаимодействия и хорошо описать поведение плотных газов до давлений 1 ГПа.

Институт стандартов США для предоставления информации о термодинамических параметрах использует аппроксимационные модели. Это позво-

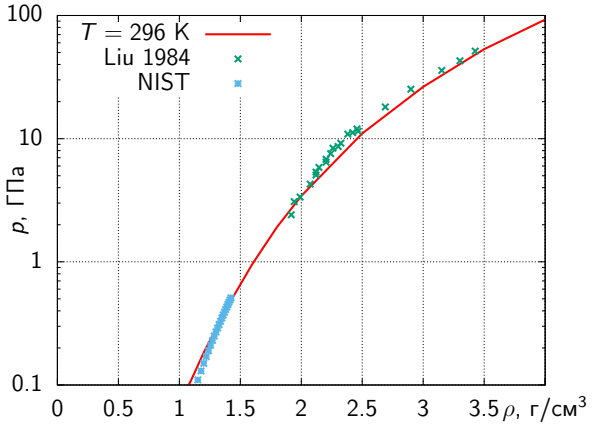


Рисунок 3.21 – Зависимости давления от плотности флюида CO_2 вдоль изотермы 196 K: NIST – [124], Liu – [142].

ляет осуществлять полноценную калибровку и проводить сравнение для произвольных плотностей и температур вещества.

Калибровка по данным института стандартов США позволила убедиться в эффективности модели в диапазоне небольших температур (до 1000 K) и небольших давлений (до 1 ГПа) для отдельных компонент. Результаты сравнения для более широкого списка составов приведены в приложении.

Калибровка по сжатию в алмазных наковальнях

Современная техника алмазных наковален позволяет получить рекордные сжатия вещества в контролируемых условиях по температуре. На рисунке 3.21 приведено сравнение расчетной изотермы сжатия диоксида углерода с экспериментальными данными.

Используя данные других исследований, проведена калибровка модели в широком диапазоне давлений, для некоторых составов – до давления 100 ГПа. Температура при этом обычно не превышает нескольких сотен градусов Кельвина.

Калибровка по ударным адиабатам сжиженных газов

Для ряда химических компонент было проведено сравнение модели с банком данных ударных адиабат сжиженных газов [143].

Для построения ударной адиабаты численно решалось нелинейное урав-

нение Гюгонио

$$(e - e_0) - \frac{p + p_0}{2}(1/\rho_0 - 1/\rho) = 0, \tag{3.20}$$

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 (3.20) 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 [78].

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. Для некоторых компонент дополнительно проведено сравнение зависимостей температур на ударной адиабате (рис. 3.22 и рис. 3.23).

Более подробное сравнение с экспериментальными данными и моделями изотермического сжатия и параметрам ударных волн сжиженных газов приведено в приложении Б. При этом использованы данные сборников [124, 143, 144] и оригинальных работ [142, 145–161].

Для ударных волн в сжиженных газах в рассмотренном диапазоне давлений до 100 ГПа заметной диссоциации молекул не происходит. Хорошее соответствие модели параметрам ударных волн подтверждает корректный подбор межмолекулярного потенциала взаимодействия для молекул одного вида. Проверка эффективности модели для смесей из разных молекул и сильно неравновесных смесей из атомов и радикалов (C, H, O, N, OH, NO) требует дополнительных исследований.

Калибровка по параметрам детонации конденсированных взрывчатых веществ

Для проверки корректности вычисления равновесного химического состава было проведено тестирование модели на параметрах детонации конденси-

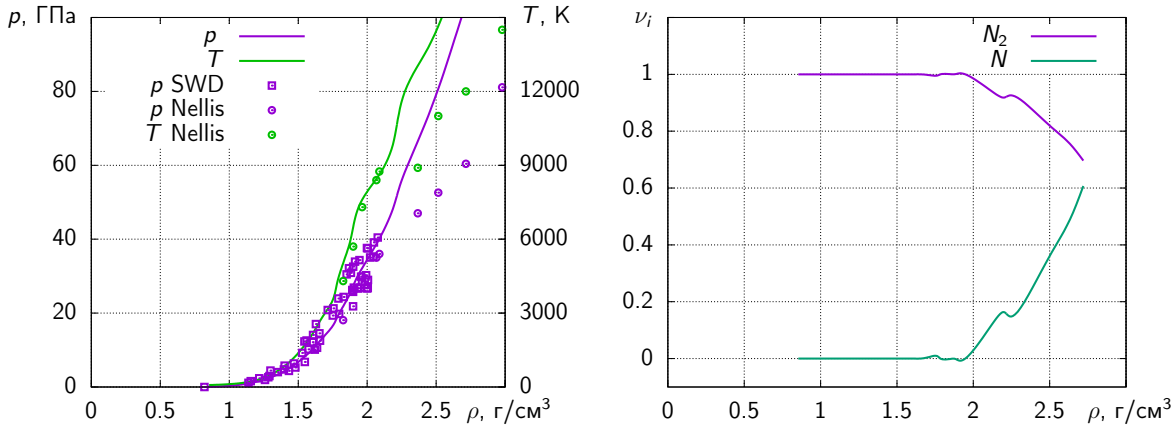


Рисунок 3.22 – Ударная адиабата сжиженного азота: $T_0 = 77.4$ K, $\rho_0 = 0.808$ г/см^3. Сплошные линии – вычисление по модели, 1 – данные сборника [143], 2 – данные [147].

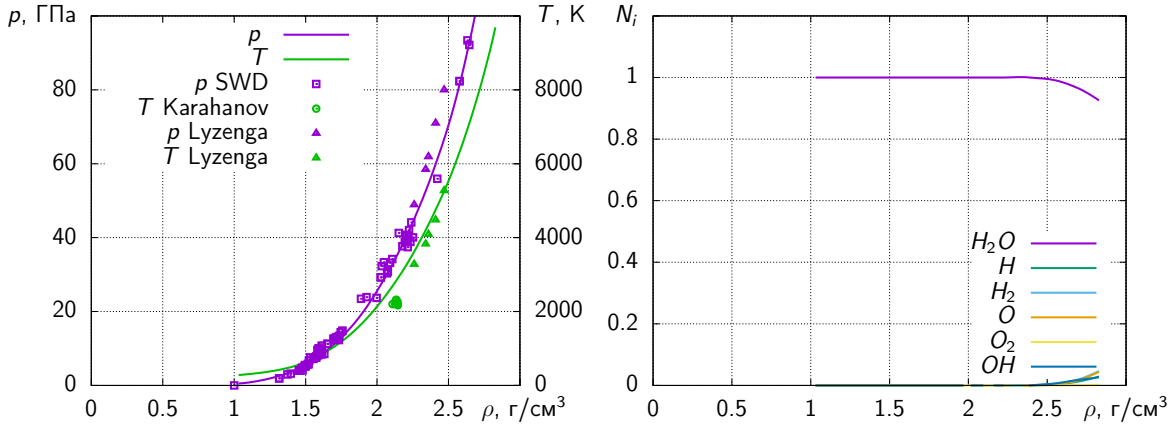
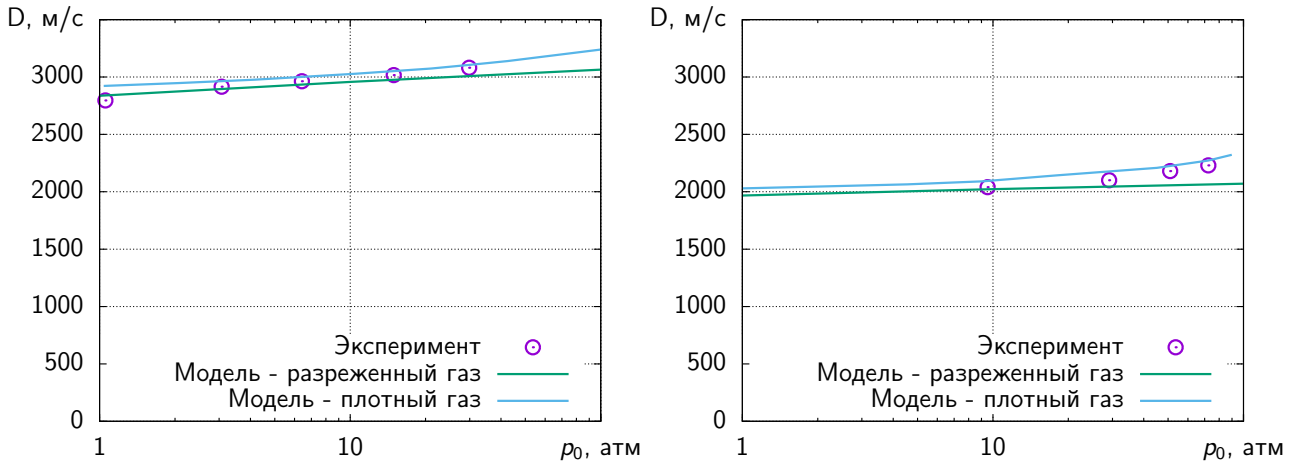


Рисунок 3.23 – Ударная адиабата H_2O: SWD – [143], Karahanov – [157], Lyzenga – [158]. Начальное состояние: $\rho_0 = 0.994$ г/см^3, $T_0 = 300$ K.

рованных взрывчатых веществ.

Для определения параметров детонации Чепмена-Жуге строилась ударная адиабата продуктов взрыва (3.20), 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 (3.18). Начальная плотность энергии e_0 вычислялась из стандартной энтальпии образования исходных компонент детонирующей смеси.

В работе [162] были измерены зависимости скорости детонации горючих газов при большом давлении (до 80 атм). В этих условиях плотность веще-



а) б)

Рисунок 3.24 – Зависимости скорости детонации горючих газов при больших начальных давлениях: а – смесь $2H_2 + O_2$, б – смесь $CH_4 + 2O_2 + 4N_2$. Экспериментальные данные из [162].

ства относительно невелика и влияние взаимодействия молекул только начинает проявляться. На рисунке 3.24 приведено сравнение двух моделей с экспериментальными данными. Для смеси на основе водорода обе модели дают близкие значения, хорошо соответствующие экспериментальным данным. Для смеси на основе метана взаимодействие молекул проявляется более значительно и модель для плотных газов лучше описывает зависимость скорости детонации от давления.

Структура модели плотных газов обеспечивает хорошую асимптотику для описания разреженных газов. Приведенное сравнение также показало хорошее количественное описание в области слабого влияния взаимодействия молекул. Сравнение косвенно подтверждает корректное определение равновесного химического состава при плотностях до 0.1 г/см^3.

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. 3.25) и смеси на основе аммиачной селитры (рис. 3.26) приведено подробное сравнение модели и доступных экспериментальных данных. Меха-

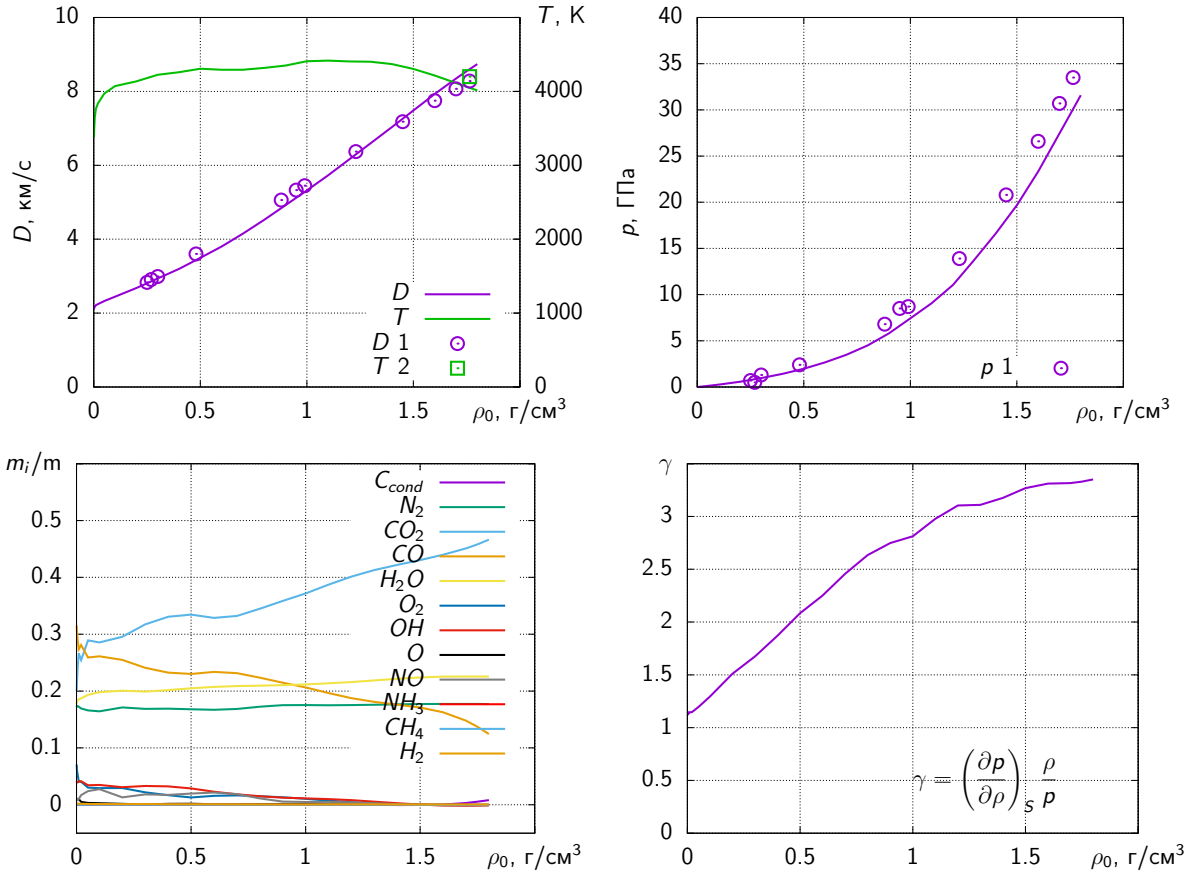


Рисунок 3.25 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности для тэна ($C_5H_8N_4O_{12}$, $\Delta_f H^\circ_{cond} = -1.704$ МДж/кг). Сплошные линии – вычисления по модели, 1 – данные работы [163], 2 – [164].

нические параметры течения: скорость волны и давление очень хорошо для взрывного эксперимента предсказываются моделью.

Нерегулярные экспериментальные данные по температуре продуктов детонации хорошо описываются, но окончательного вывода сделать нельзя – требуются дополнительные экспериментальные данные.

Для смесей, формирующих большое количество (более 5 массовых процентов) конденсированного углерода, наблюдается некоторое отклонение модели от экспериментальных данных. Для таких составов удается добиться только качественной предсказательной силы модели (рис. 3.27, 3.28). Результаты более полного сравнения с широким набором взрывчатых составов приведены в приложении.

Детонационные характеристики исследованных смесей в основном опре-

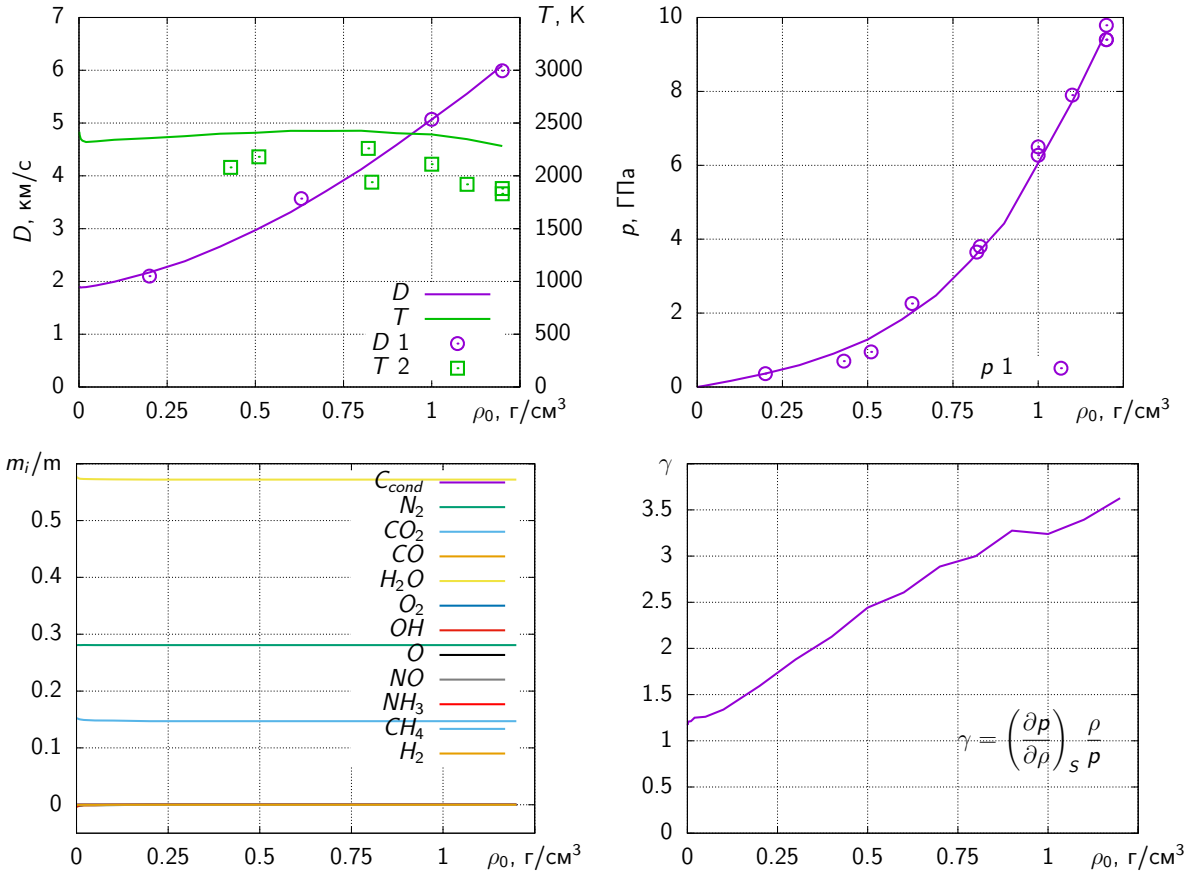


Рисунок 3.26 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности смеси на основе аммиачной селитры. Массовые доли компонент: 79 нитрат аммония, 15 вода, 6 стеариновая кислота ($\Delta_f H^\circ_{cond} = -6.172$ МДж/кг). Сплошные линии – вычисления по модели, 1 – данные работы [165], 2 – [166].

деляются свойствами CO, CO_2, N_2, H_2O компонент. Данных по прямому измерению химического состава продуктов детонации конденсированных взрывчатых веществ нет. Корректность определения химического состава косвенно подтверждается хорошим совпадением газодинамических параметров детонационного течения. Из сравнения с экспериментальными данными можно сделать осторожный вывод о корректности определения химического состава и других термодинамических характеристик в диапазоне температур до 5 000 K и давлений до 50 ГПа.

Работоспособность модели на ударных адиабатах для перечисленных компонент подтверждена и в более широком диапазоне: по температуре до 10 000 K и давлению до 100 ГПа, но нет экспериментальных данных для

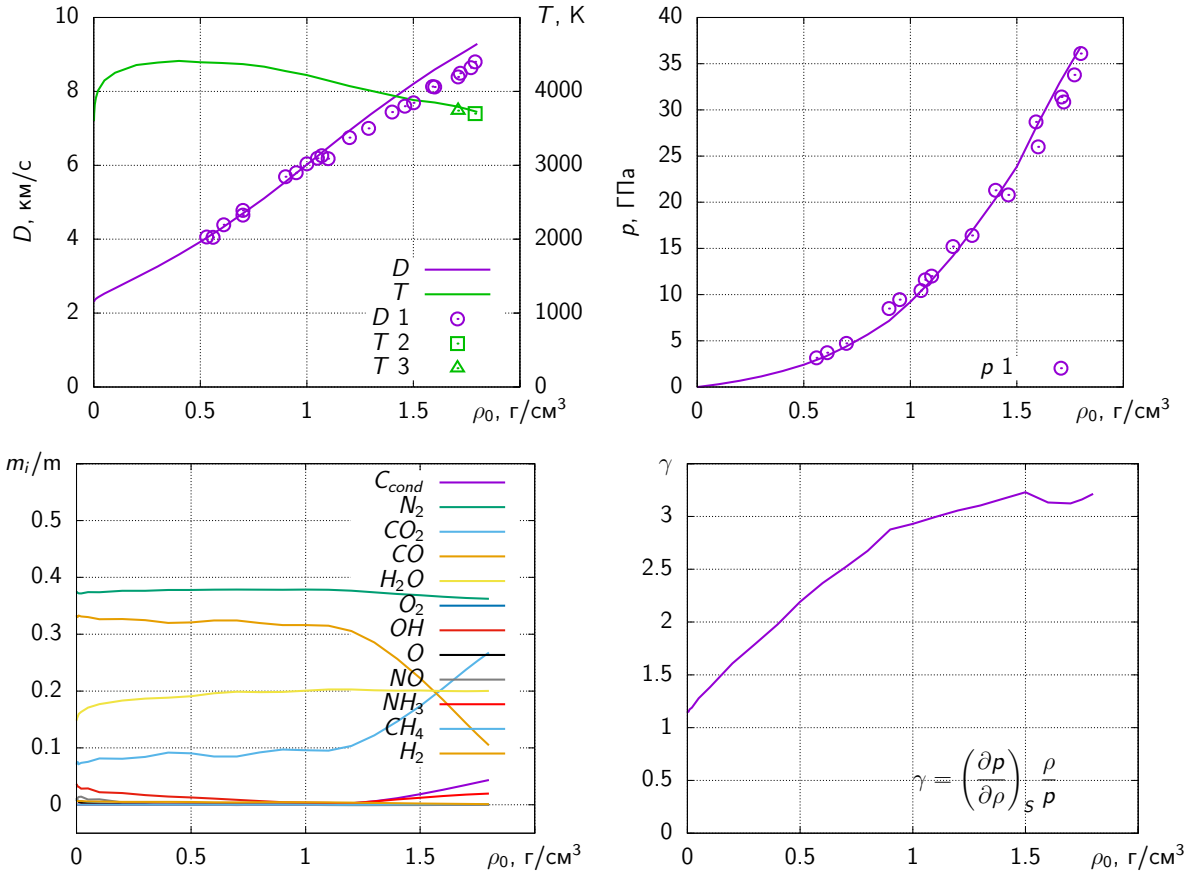


Рисунок 3.27 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности для гексогена ($C_3H_6N_6O_6$, $\Delta_f H^\circ_{cond} = 0.277$ МДж/кг). Сплошные линии – вычисления по модели, 1 – данные работы [99], 2 – [164], 3 – [167].

количественной проверки модели для описания смеси реагирующих плотных газов в более широком диапазоне.

Компоненты O_2, H_2, CH_4, NH_3, NO и OH образуются в малых концентрациях. Корректность их учета не подтверждена. Общее влияние этих компонент на энергию смеси и механику взрывных течений мало, но они могут иметь значение для вопросов охраны труда и экологии.

Атомы N, O и H вообще не наблюдались в составе продуктов детонации. Их учет в модели для исследованных условий избыточен, но необходим для контроля корректности выбора рассматриваемых химических компонент.

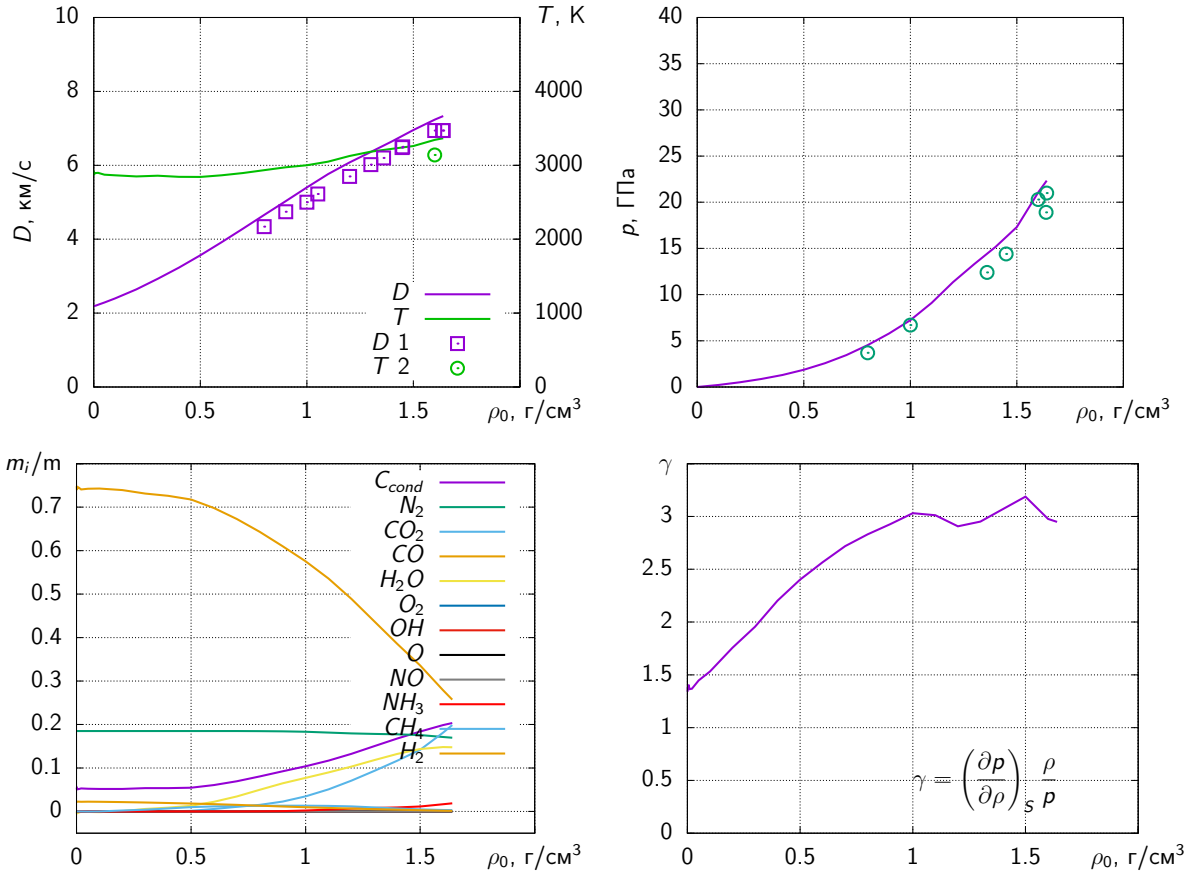


Рисунок 3.28 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности для тротила ($C_7H_5N_3O_6$, $\Delta_f H^\circ_{cond} = -0.328$ МДж/кг). Сплошные линии – вычисления по модели, 1 – данные работы [163], 2 – [164].

Калибровка по адиабатам разгрузки продуктов детонации энергетических составов

Используя соотношение (3.19) в базовых параметрах плотность и давление численно строилась адиабата разгрузки продуктов детонации (рис. 3.29).

Редкие доступные данные расчетного комплекса CHEETAH позволяют сделать вывод о схожести моделей. Ценным моментом является хорошее соответствие температур вдоль адиабат. Температура обычно плохо измеряется в эксперименте, и в моделях ее также стараются избегать.

Важно отметить интересный момент – после зоны химической реакции, от плоскости Чепмена-Жуге вдоль адиабаты разгрузки, равновесный химический состав значительно изменяется. Модель предполагает, что равновесный химический состав успевает формироваться. До температуры около 1000

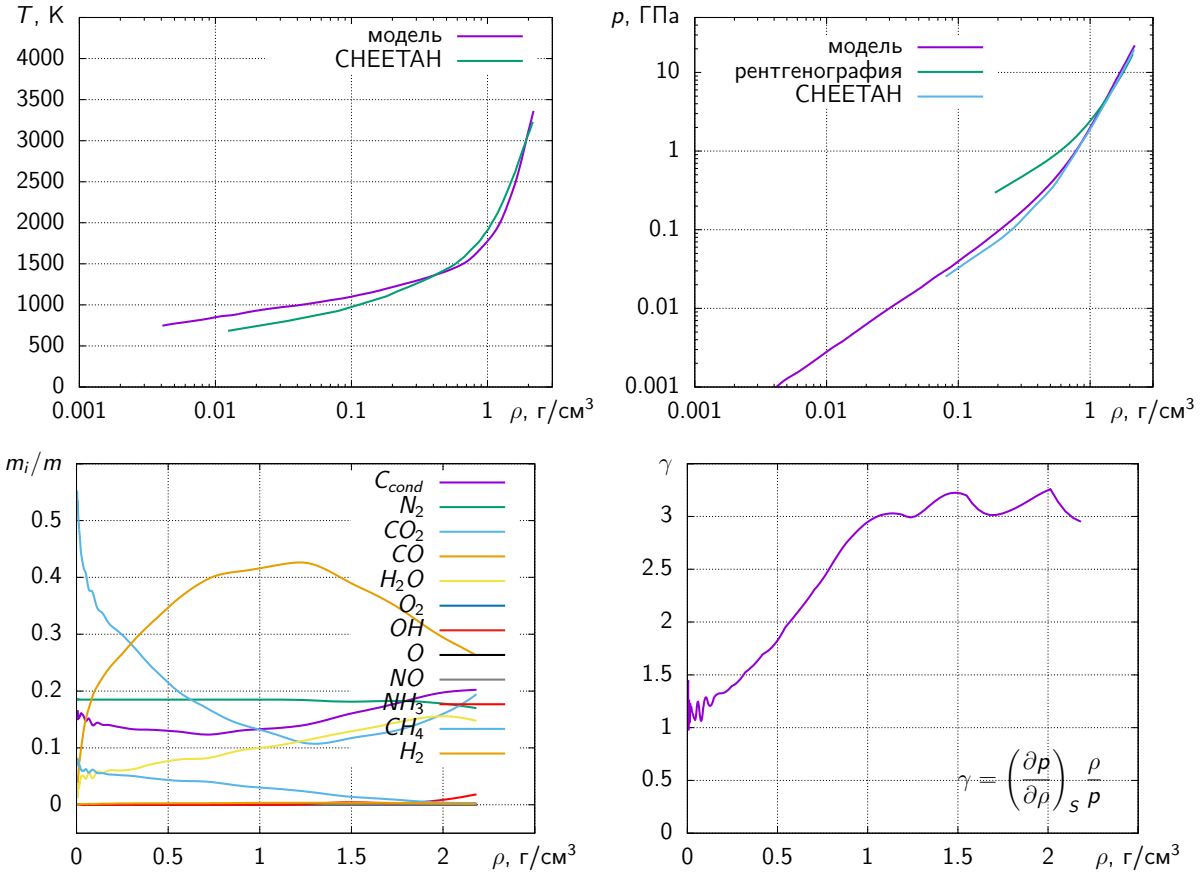


Рисунок 3.29 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации заряда тротила с начальной плотностью $\rho_0 = 1.63$ г/см^3. CHEETAH – [168].

Кельвин это предположение представляется разумным, но при более низких температурах с большей вероятностью происходит заморозка химического состава.

Численно интегрируя инвариант Римана, используя соотношения (3.19) и (3.18),

$$u(\rho) + \int_{\rho_J}^{\rho} \frac{c(\rho)}{\rho} d\rho = const = u_J, \tag{3.21}$$

получаем соотношение в волне разрежения между давлением и массовой скоростью.

Приведенное на рисунке 3.30 сравнение параметров волны разрежения с экспериментальными данными подтверждает эффективность модели для описания термодинамики и газовой динамики течений продуктов детонации.

Широкое сравнение с экспериментальными данными детонационных характеристик приведено в приложении В. При этом использовались данные

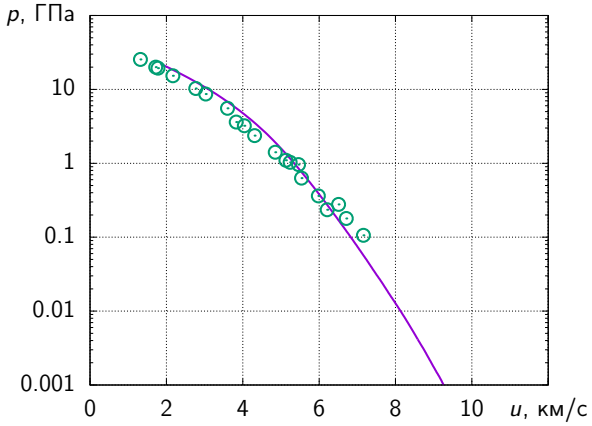


Рисунок 3.30 – Волна разрежения из начальных условий соответствующих параметрам детонации тротила с начальной плотностью $\rho_0 = 1.63$ г/см^3: сплошная кривая – расчет по модели, символы – данные работы [98].

сборников [91, 104, 115, 169–171] и оригинальных работ.

3.3.4 Программный комплекс термодинамических расчетов для плотных реагирующих газов

В зависимости от рассматриваемой температуры и плотности, равновесный химический состав смеси сильно меняется. Часто заранее его предугадать сложно, и приходится проводить вычисления с сильно неравновесными смесями. Для повышения устойчивости, при моделировании смеси из 15 реагирующих компонент используется заведомо избыточное количество (26) реакций.

Ниже приведена часть кода программы с балансом химических реакций, вдоль которых ищется равновесный химический состав.

```
move_chem_A_B(reactor, 2, "O", 1, "O2");
move_chem_A_B(reactor, 2, "H", 1, "H2");


move_chem_AB_C(reactor, 2, "H2", 1, "O2", 2, "H2O");
move_chem_AB_C(reactor, 2, "H", 1, "O", 1, "H2O");
move_chem_AB_C(reactor, 1, "H2", 1, "O", 1, "H2O");
move_chem_AB_C(reactor, 2, "OH", 1, "H2", 2, "H2O");
move_chem_AB_C(reactor, 1, "OH", 1, "H", 1, "H2O");
```

```
move_chem_AB_C(reactor, 1, "H2O", 1, "O", 2, "OH");


move_chem_AB_C(reactor, 1, "N2", 1, "O2", 2, "NO");
move_chem_AB_C(reactor, 3, "H2", 1, "N2", 2, "NH3");


move_chem_AB_CD(reactor, 4, "NH3", 3, "O2",  6, "H2O", 2, "N2");
move_chem_AB_C(reactor, 1, "CO", 1, "O",  1, "CO2");
move_chem_AB_C(reactor, 2, "CO", 1, "O2", 2, "CO2");


move_chem_AB_CD(reactor, 1, "H2O", 1, "CH4", 1, "CO", 3, "H2");
move_chem_AB_CD(reactor, 2, "H2O", 1, "CH4", 1, "CO2", 4, "H2");
move_chem_AB_CD(reactor, 1, "H2O", 1, "CO", 1, "CO2", 1, "H2");


move_chem_AB_CD(reactor, 1, "CH4", 2, "O2",  1, "CO2", 2, "H2O");
move_chem_AB_CD(reactor, 2, "CH4", 3, "O2",  2, "CO",  4, "H2O");
move_chem_AB_CD(reactor, 1, "CH4", 1, "CO2", 2, "CO",  2, "H2");
move_chem_AB_CD(reactor, 1, "CH4", 3, "CO2", 4, "CO",  2, "H2O");


// Na Acond <-> Nc C.   A - cond; C - gase
move_chem_Acond_C(reactor, 1, "Ccond", 1, "C");


// Na Acond + Nb B <-> Nc C.   A - cond; B, C - gase
move_chem_AcondB_C(reactor, 1, "Ccond", 1, "CO2", 2, "CO");
move_chem_AcondB_C(reactor, 1, "Ccond", 1, "O2", 1, "CO2");
move_chem_AcondB_C(reactor, 2, "Ccond", 1, "O2", 2, "CO");
move_chem_AcondB_C(reactor, 1, "Ccond", 1, "O", 1, "CO");
move_chem_AcondB_C(reactor, 1, "Ccond", 2, "H2", 1, "CH4");
```

Используя многократное дублирование каналов реакций, удается значительно повысить устойчивость и скорость работы алгоритма. В большинстве случает алгоритм автоматически сходится при любом начальном, даже сильно отличном от равновесного, химическом составе.

Нерешенной остается проблема длительности вычислений: для определе-

ния одного равновесного состава смеси уходит несколько часов. Для ускорения вычислений на плоскости температура/плотность строится разреженная сетка. Все базовые параметры: химический состав, давление и внутренняя энергия вычисляются только в узлах и запоминаются. Для всех других значений температуры и плотности проводится интерполяция.

Описанные усовершенствования позволили создать программный комплекс удаленных вычислений термодинамических параметров и простых течений (http://ancient.hydro.nsc.ru/chem). Внешний вид выдачи вычислений представлен на рисунке 3.31.

Возможности программного комплекса.

- Вычисление равновесного химического состава смеси газов: Ar, Ne, He, Kr, N_2, N, O_2, O, H_2, H, H_2O, OH, NH_3, CO, CO_2, CH_4, NH_3, NO и конденсированного углерода в широком диапазоне параметров. Для ряда компонент в промежутке от 200 до 6 000 K и давлений до 50 ГПа.

- Вычисление ряда термодинамических параметров при заданной температуре и плотности смеси: равновесный химический состав, давление, внутренняя энергия, теплоемкости, показатель адиабат, скорость звука.

- 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 [40, 41].

3.3.5 Заключение

Используя методы статистической физики и молекулярной динамики, построена модель уравнения состояния смеси реагирующих плотных газов для условий взрыва. Для определения химического состава, давления и внутренней энергии численно моделируется ансамбль молекул, взаимодействующих

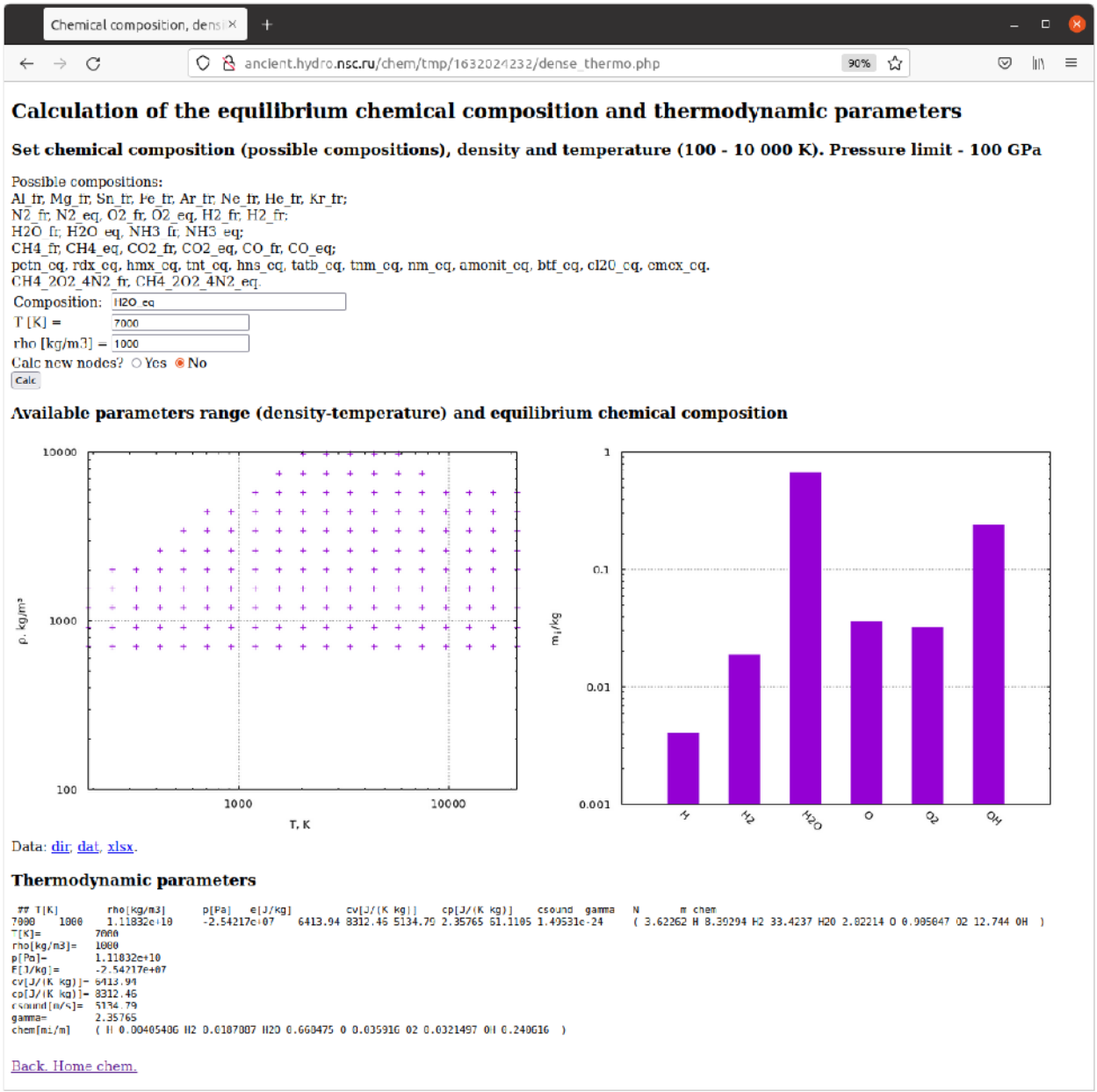


Рисунок 3.31 – Результаты выдачи программного комплекса параметров воды при плотности 1000 кг/м^3 и температуре 7 000 К.

с парным центральным потенциалом exp-6. Подбор параметров взаимодействия в основном определялся из условий соответствия критической температуре и плотности чистых компонент. Дополнительная калибровка проводилась из условий хорошего соответствия ударным адиабатам сжиженных газов. Описанный подход позволяет построить один набор параметров модели работающий в широком диапазоне давлений, температур и химических составов смесей.

На основе описанного алгоритма разработан программный комплекс в виде библиотеки на языке программирования C++ и утилит с веб интерфейсом (http://ancient.hydro.nsc.ru/chem), позволяющим проводить онлайн расчеты термодинамических параметров реагирующих газов и ряда простых газодинамических течений, в том числе ударных и детонационных волн.

Для большинства химических компонент проведено тестирование параметров модели путем сравнения с имеющимися экспериментальными данными: таблицами термодинамических величин Американского института стандартов, ударными адиабатами сжиженных газов и параметрами детонации конденсированных взрывчатых веществ. Показано хорошее согласие.

Предшествующими исследователями была продемонстрирована эффективность подобных подходов для широкого задач экстремальной термодинамики, в том числе для описания продуктов детонации конденсированных взрывчатых веществ. В качестве подтверждения корректности работы модели, приводилось сравнение параметров детонации Чепмена-Жуге для зарядов с одной плотностью или для разных плотностей для хорошо изученных взрывчатых веществ тэна и гексогена. Новизна данной работы заключается в широком тестировании модели на большом наборе данных разных экспериментальных методик. Относительно небольшим набором параметров, описывающих каждую химическую компоненту, удалось разумно описать поведение разных составов в широком диапазоне давлений и температур. Кроме того, отдельно протестированная в предыдущей главе асимптотика поведения

модели при малых плотностях гарантирует работоспособность до диапазона разреженных газов.

3.4 Заключение

Разработана эффективная модель уравнения состояния плотных газов с учетом равновесного химического состава. Модель основывается на классическом молекулярном динамическом моделировании небольшого ансамбля молекул, взаимодействующих с парным потенциалом exp-6, при этом давление и полная энергия системы вычисляются путем интегрирования всех парных сил и потенциальных энергий взаимодействия между молекулами.

Равновесный состав подбирается методом реагирующего ансамбля Монте-Карло (Reactive Monte Carlo). Модель позволяет определять термодинамические параметры плотных газов в диапазоне температур от нормальных условий до 5 000 K и давлений до 50 ГПа. Путем сравнения с экспериментальными данными показана эффективность определения детонационных параметров для составов, не формирующих большое количество конденсированного углерода.

Основные результаты по главе представлены в публикации [37].

Заключение

Все поставленные в диссертационной работе задачи выполнены, достигнутые результаты по характеристикам экспериментальной станции и возможностям разработанного уравнения состояния соответствуют исходным требованиям. В этих рамках диссертационная работа является полностью законченной.

Хотелось бы отметить научную нишу достигнутых результатов и сформулировать направления дальнейшего развития.

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. В большой степени достигнуты предельные возможности ускорителя, дальнейшее улучшение возможно только при радикальной переделке всего оборудования станции. Пока это не представляется разумным. Дальнейшее развитие видится в активной стабильной эксплуатации станции и в поиске новых объектов исследований.

2. Реализована оригинальная методика, позволяющая определять распределение газодинамических параметров цилиндрически-симметричного 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.

Разработанные методики восстановления распределения плотности и газодинамических параметров детонационного течения удается применять для исследования новых взрывчатых составов. Есть некоторый потенциал в улучшении точности измерений, это позволит более стабильно и в более широком диапазоне плотностей экспериментально определять адиабаты разгрузки продуктов детонации. В рамках текущих возможностей, копится банк адиабат разгрузки продуктов детонации, для удобства использования полученных данных для численных расчетов запланирован подбор параметров уравнения состояния в виде JWL.

Учет кривизны детонационного фронта в методе подбора давления позволит определять газодинамические параметры в зоне химической реакции детонационного фронта. С точки зрения эксперимента и построения моделей это сложный объект для исследований, где трудно говорить об уравнении состояния и о газодинамических характеристиках течения. Видна перспектива разработать новый метод получения актуальных осредненных параметров в зоне энерговыделения.

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 K и давлений до 50 ГПа.

Модель показала свою эффективность. Относительно несложный состав продуктов взрыва позволил одним набором параметров описать поведение вещества от начальных условий – атмосферное давление и комнатная температура до параметров в условиях взрыва конденсированных взрывчатых веществ. Модель разумно соответствует тестам на широком наборе экспериментальных данных. По моему мнению, для такого простого потенциала взаимодействия молекул не стоит ожидать более точного согласия с экспериментом. Но в рамках модели для удается описать широкий диапазон параметров и использовать ее для исследования новых систем.

Список литературы

1. Наблюдение переходных процессов в малоплотных ВВ с помощью СИ / П. И. Зубков, Г. Н. Кулипанов, Л. А. Лукьянчиков, А. Л. Мержиевский, Э. Р. Прууэл, К. А. Тен, В. М. Титов, Б. П. Толочко, М. Г. Федотов, М. Р. Шарафутдинов, М. А. Шеромов // Вещества, материалы и конструкции при интенсивных динамических воздействиях. Труды международной конференции V Харитоновские тематические научные чтения. — Саров: ВНИИЭФ, 2003. — С. 204–208. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2003/2003_sarov_01_ru.pdf.

2. *Прууэл Э. Р.* Инициирование зарядов пористого вторичного взрывчатого вещества потоком горячих газов : Диссертация на соискание степени кндидата физико-математических наук / Прууэл Э. Р. — Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 2003. — 95 с. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2003/pruuel_disser.pdf.

3. Измерение распределения плотности в детонационных процессах с помощью синхротронного излучения : Препринт / К. А. Тен, О. В. Евдоков, И. Л. Жогин, В. В. Жуланов, П. И. Зубков, Г. Н. Кулипанов, Л. А. Лукьянчиков, Л. А. Мержиевский, Б. Б. Пирогов, Э. Р. Прууэл, В. М. Титов, Б. П. Толочко, М. А. Шеромов ; Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН. — 2005. — 31 с. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2005/2005_inp_01_ru.pdf.

4. Density distribution reconstruction of the detonation front of high explosives using synchrotron radiation data / K. A. Ten, O. V. Evdokov, I. L. Zhogin, V. V. Zhulanov, P. I. Zubkov, G. N. Kulipanov, L. A. Luk'yanchikov, L. A. Merzhievsky, B. Y. Pirogov, E. R. Pruuel, V. M. Titov, B. P. Tolochko, M. A. Sheromov // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. — 2005. — Vol. 543. — P. 170–174. —

DOI: 10.1016/j.nima.2005.01.142. — URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016890020500241X.

5. Synchrotron diagnostics of shock-wave compression of aerogel / L. A. Merzhievsky, L. A. Lukianchikov, E. R. Pruuel, K. A. Ten, V. M. Titov, B. P. Tolochko, E. V. Evdokov, I. L. Zhogin, M. A. Sheromov // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2007. — Vol. 575, N 1. — P. 121–125. — ISSN 0168-9002. — DOI: 10.1016/j.nima.2007.01.040. — URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900207000812 ; Proceedings of the XVI International Synchrotron Radiation Conference.

6. 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. — ISSN 0168-9002. — DOI: 10.1016/j.nima.2007.01.039. — URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900207000800.

7. 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. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2007/2007_ces_02_ru.pdf.

8. Распределение плотности во фронте детонации цилиндрических зарядов малого диаметра. / К. А. Тен, О. В. Евдоков, И. Л. Жогин, В. В. Жуланов, П. И. Зубков, Г. Н. Кулипанов, Л. А. Лукьянчиков, Л. А. Мержиевский, Б. Я. Пирогов, Э. Р. Прууэл, В. М. Титов, Б. П. То-

лочко, М. А. Шеромов // Физика горения и взрыва. — 2007. — Т. 43, № 2. — С. 91–99. — URL: https://www.sibran.ru/upload/iblock/508/508cfa94c75c5211ee5c361a84727fc2.pdf.

9. Синхротронная томография плотности, скорости и давления / К. А. Тен, Э. Р. Прууэл, Л. А. Лукьянчиков, Л. А. Мержиевский, Б. П. Толочко, И. Л. Жогин, В. В. Жуланов, Л. И. Шехтман // Физика экстремальных состояний вещества – 2008. — 2008. — С. 136–138. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2008/2008_elbrus_01_ru.pdf.

10. Density evolution during the initiation of detonation in porous petn / E. R. Pruuel, A. O. Kashkarov, L. A. Lukyanchikov, L. A. Merzhievsky // Physics of Extreme states of Matter-2009 / ed. by V. E. Fortov, et al. — Chernogolovka : Institute of Problems of Chemical Physics RAS, 2009. — P. 128–130. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2009/2009_elbrus_03_en.pdf.

11. *Kuper K. E.*, *Ten K. A.*, *Pruuel E. R.* High explosives examination by high-resolution X-ray computed tomography on the VEPP-3 synchrotron radiation // Physics of Extreme states of Matter-2009 / ed. by V. E. Fortov, et al. — Chernogolovka : Institute of Problems of Chemical Physics RAS, 2009. — P. 130–132. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2009/2009_elbrus_02_en.pdf.

12. Поле течения продуктов взрыва трубчатого заряда ВВ / Э. Р. Прууэл, Л. А. Мержиевский, К. А. Тен, Л. А. Лукьянчиков, В. М. Титов // Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны. Труды международной конференции "XI Харитоновские тематические научные чтения". — 2009. — С. 430–434.

13. 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. — ISSN 0168-9002. — DOI: 10.1016/j.nima.2008.12.192. — URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900208021050 ; Proceedings of the XVII International Synchrotron Radiation Conference.

14. 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.

15. Абляционное горение вторичных порошковых взрывчатых веществ / Л. А. Лукьянчиков, Э. Р. Прууэл, А. О. Кашкаров, К. А. Тен // Прикладная механика и техническая физика. — 2010. — № 4. — С. 5–16. — URL: https://sibran.ru/upload/iblock/e87/e8772d96dbfca6465ca3cae2ba8dc484.pdf.

16. Детектор для изучения взрывных процессов на пучке синхротронного излучения / В. М. Аульченко, О. В. Евдоков, И. Л. Жогин, В. В. Жуланов, Э. Р. Прууэл, Б. П. Толочко, К. А. Тен, Л. И. Шехтман // Приборы и техника эксперимента. — 2010. — № 3. — С. 20–35. — ISSN 0032-8162. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2010/2010_net_ru.pdf.

17. 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. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2010/12620-pruuel.pdf.

18. 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. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2011/2011_fgv.pdf.

19. Быстрый переход горения в детонацию в двухфазной системе – эксперимент и численное моделирование [Электронный ресурс] / А. П. Ершов, А. О. Кашкаров, Л. А. Лукьянчиков, Э. Р. Прууэл // Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика / Международная конференция, посвященная 90-летию со дня рождения академика Н.Н. Яненко, Новосибирск, Россия, 30 мая – 4 июня 2011 г. — 2011. — URL: http://conf.nsc.ru/files/conferences/niknik-90/fulltext/38046/44622/ershov.pdf.

20. 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.

21. Structure of condensed heterogeneous explosives / L. C. Badretdinova, K. A. Ten, E. R. Pruuel, L. A. Lukyanchikov, B. P. Tolochko, M. R. Sharafutdinov, A. N. Shmakov, A. K. Muzyrya, O. V. Kostitsyn, E. B. Smirnov, K. E. Kuper. // Physics of Extreme States of Matter-2013. — 2013. — P. 79–84.

22. 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. — DOI:

10.7868/S086956521301012X. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2013/dan_DOK0038.pdf.

23. Инициирование детонации пористого ВВ высокоэнтальпийным потоком газа / А. П. Ершов, А. О. Кашкаров, Л. А. Лукьянчиков, Э. Р. Прууэл // Физика горения и взрыва. — 2013. — № 1. — С. 91–105. — URL: http://www.sibran.ru/upload/iblock/8f7/8f7c3cd9a42e25747d1754d66d66e476.PDF.

24. 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. — DOI: 10.7868/S036767651302035X. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2013/IFI0254.pdf.

25. 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. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2013/Ten_2013_1.pdf.

26. Ударное сжатие наноструктурных пористых материалов / К. А. Тен, Э. Р. Прууэл, Л. А. Лукьянчиков, Б. П. Ефремов, Е. В. Беспалов, Б. П. Толочко, В. В. Жуланов, Л. И. Шехтман // Научный вестник НГТУ. — 2013. — Т. 50, № 1. — С. 139–146. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2013/Ten_2013_2.pdf.

27. Investigation of Micro-, Meso-, and Macrostructure of the Pressed Parts Made of HE TATB / L. K. Badretdinova, K. A. Ten, E. R. Pruuel, L. A.

Lukyanchikov, B. P. Tolochko, M. R. Sharafutdinov, A. N. Shmakov, A. K. Muzyrya, O. V. Kostitsyn, E. B. Smirnov, K. E. Kuper // Proceedings Fifteenth International Detonation Symposium. — 2015. — P. 1339–1345. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2015/Badretdinova_TATB.pdf.

28. 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. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2015/Pruuel_Tomography_IDS14.pdf.

29. Shock Hugoniot data for different initial density of TATB-based HE using synchrotron radiation / A. O. Kashkarov†, E. R. Pruuel†, K. A. Ten, Y. A. Aminov, O. V. Kostitsyn, A. K. Muzyrya, E. B. Smirnov // Proceedings Fifteenth International Detonation Symposium. — 2015. — P. 734–739. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2015/Kashkarov_IDS14.pdf.

30. *Kashkarov A. O.*, *Ershov A. P.*, *Pruuel E. R.* On peculiarities of near-threshold initiation of powder density explosive by air shock wave and by solid impactor // Journal of Physics: Conference Series. — 2016. — Vol. 754. — P. 052001. — DOI: 10.1088/1742-6596/754/5/052001.

31. 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.

32. The Synchrotron Radiation Beamline 8-b at VEPP-4 Collider for SAXS, WAXS and Micro Tomography Investigation of Fast Processes at Extreme Condition of High Temperature and Pressure with Nanosecond Time Resolution / B. P. Tolochko, A. V. Kosov, O. V. Evdokov, I. L. Zhogin, K. A. Ten, E. R. Pruuel, L. I. Shekchtman, V. M. Aulchenko, V. V. Zhulanov, P. F. Piminov, V. P. Nazmov, K. V. Zolotarev, G. N. Kulipanov. // Physics Procedia. — 2016. — Vol. 84. — P. 427–433. — DOI: 10.1016/j.phpro.2016.11.072. — URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1875389216303674.

33. 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. — Sept. — Vol. 899. — P. 042004. — DOI: 10.1088/1742-6596/899/4/042004.

34. 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.

35. 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.

36. Исследование взрывчатости аэровзвесей сульфидных руд при динамическом нагреве / А. В. Пинаев, П. А. Пинаев, А. А. Васильев, Э. Р. Прууэл, А. А. Еременко, Ю. Н. Шапошников // Вестник научного центра по безопасности работ в угольной промышленности. — 2018. — № 2. — С. 45–51. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2018/bezopasnost.pdf.

37. *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. — DOI: 10.15372/FGV20210507.

38. 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. — DOI: 10.15372/FGV20210311.

39. Исследование быстропротекающих процессов с использованием синхротронного излучения [Электронный ресурс] / Э. Р. Прууэл, К. А. Тен, А. О. Кашкаров, И. А. Рубцов. — 2021. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl (дата обр. 16.09.2021).

40. *Прууэл Э. Р.* Метод расчета равновесного химического состава и термодинамических параметров плотных газов. Свидетельство государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019666436. — 2019.

41. *Прууэл Э. Р.*, *Анисичкин В. Ф.* Метод расчета равновесных ударных адиабат в плотных газах. Свидетельство государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019666437. — 2019.

42. *Кулипанов Г.*, *Скринский А.* Использование синхротронного исзлучения: состояние и перспективы // Успехи физических наук. — 1977. — Т. 122, № 3. — С. 369–418.

43. *Bilderback D. H.*, *Elleaume P.*, *Weckert E.* Review of third and next generation synchrotron light sources // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2005. — Апр. — Т. 38, № 9. — S773–S797. — DOI: 10.1088/0953-4075/38/9/022.

44. *Mobilio S.*, *Boscherini F.*, *Meneghini C.* Synchrotron Radiation: Basics, Methods and Applications. — 2015. — 799 с. — DOI: 10.1007/978-3-642-55315-8.

45. Электрон-позитронный накопитель ВЭПП-3 [Электронный ресурс]. — 2022. — URL: http://v4.inp.nsk.su/vepp3/index.html (дата обр. 14.02.2022).

46. Применение синхротронного излучения для исследования детонационных и ударно-волновых процессов : Препринт / А. Н. Алешаев, О. В. Евдоков, П. И. Зубков, Г. Н. Кулипанов, Л. А. Лукьянчиков, Н. З. Ляхов, С. И. Мишнев, К. А. Тен, В. М. Титов, Б. П. Толочко, М. Г. Федотов, М. Р. Шарафутдинов, М. А. Шеромов ; Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН. — 2000. — 52 с. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2000/2000_inp_01_ru.pdf.

47. Real-time microstructure of shocked LiF crystals: Use of synchrotron x-rays / S. J. Turneaure, Y. M. Gupta, K. Zimmerman, K. Perkins, C. S. Yoo, G. Shen // Journal of Applied Physics. — 2009. — Vol. 105, N 5. — P. 053520. — DOI: 10.1063/1.3080176.

48. *Тен К. А.* Использование синхротронного излучения для исследования взрывных процессов : Диссертация на соискание степени кндидата физико-математических наук / Тен К. А. — Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 2007. — 120 с.

49. 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.

50. An 800-MeV proton radiography facility for dynamic experiments / N. S. P. King [et al.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. — 1999. — Vol. 424. — P. 84–91.

51. Proton radiography experiments on shocked high explosive products / E. N. Ferm [et al.] // Shock Compression of Condensed Matter - 2003 / ed. by M. D. Furnish, Y. M. Gupta, J. W. Forbes. — Portland, Oregon (USA) : American Institute if Physics, 2003. — P. 839–842.

52. *Morris C.*, *Hopson J. W.*, *Goldstone P.* Proton Radiography // Los Alamos Science. — 2006. — № 30. — С. 32–45.

53. Протонная радиографическая установка на 70 ГэВ ускорителе ГНЦ ИФВЭ : Препринт / Ю. М. Антипов [и др.] ; Институт физики высоких энергий. — 2009. — 15 с.

54. A Radiographic Facility for the 70-GeV Proton Accelerator of the Institute of High Energy Physics / Y. M. Antipov, A. G. Afonin, A. V. Vasilevskii, I. A. Gusev, V. I. Demyanchuk, O. V. Zyat'ko, N. A. Ignashin // Instruments and Experimental Techniques. — 2010. — Vol. 53, N 3. — P. 319–326.

55. Single-bunch imaging of detonation fronts using scattered synchrotron radiation / M. H. Nielsen [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2018. — Vol. 123, N 22. — P. 225902. — DOI: 10.1063/1.5029912.

56. Gas gun shock experiments with single-pulse x-ray phase contrast imaging and diffraction at the Advanced Photon Source / S. N. Luo, B. J. Jensen, D. E. Hooks, K. Fezzaa, K. J. Ramos, J. D. Yeager, K.

Kwiatkowski, T. Shimada // Review of Scientific Instruments. — 2012. — Vol. 83, N 7. — P. 073903. — DOI: 10.1063/1.4733704.

57. Measurement of carbon condensates using small-angle x-ray scattering during detonation of the high explosive hexanitrostilbene / M. Bagge-Hansen, L. Lauderbach, R. Hodgin, S. Bastea, L. Fried, A. Jones, T. van Buuren, D. Hansen, J. Benterou, C. May, T. Graber, B. J. Jensen, J. Ilavsky, T. M. Willey // Journal of Applied Physics. — 2015. — Vol. 117, N 24. — P. 245902. — DOI: 10.1063/1.4922866.

58. Structural transformations including melting and recrystallization during shock compression and release of germanium up to 45 GPa / P. Renganathan, S. J. Turneaure, S. M. Sharma, Y. M. Gupta // Phys. Rev. B. — 2019. — Vol. 99, issue 13. — P. 134101. — DOI: 10.1103/PhysRevB.99.134101.

59. Real-time, high-resolution x-ray diffraction measurements on shocked crystals at a synchrotron facility / Y. M. Gupta, S. J. Turneaure, K. Perkins, K. Zimmerman, N. Arganbright, G. Shen, P. Chow // Review of Scientific Instruments. — 2012. — Vol. 83, N 12. — P. 123905. — DOI: 10.1063/1.4772577.

60. Impact system for ultrafast synchrotron experiments / B. J. Jensen, C. T. Owens, K. J. Ramos, J. D. Yeager, R. A. Saavedra, A. J. Iverson, S. N. Luo, K. Fezzaa, D. E. Hooks // Review of Scientific Instruments. — 2013. — Vol. 84, N 1. — P. 013904. — DOI: 10.1063/1.4774389.

61. The Dynamic Compression Sector laser: A 100-J UV laser for dynamic compression research / D. Broege, S. Fochs, G. Brent, J. Bromage, C. Dorrer, R. F. Earley, M. J. Guardalben, J. A. Marozas, R. G. Roides, J. Sethian, X. Wang, D. Weiner, J. Zweiback, J. D. Zuegel // Review of Scientific Instruments. — 2019. — Vol. 90, N 5. — P. 053001. — DOI: 10.1063/1.5088049.

62. ID19 Microtomography beamline [Электронный ресурс]. — URL: https://www.esrf.fr/home/UsersAndScience/Experiments/StructMaterials/ID19.html.

63. Ultra high-speed x-ray imaging of laser-driven shock compression using synchrotron light / M. P. Olbinado [et al.] // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2018. — Vol. 51, N 5. — P. 055601. — DOI: 10.1088/1361-6463/aaa2f2.

64. Hugoniot Measurements Utilizing In Situ Synchrotron X-ray Radiation / D. J. Miller, R. S. Crum, M. A. Homel, D. E. Eakins, D. J. Chapman, J. C. Z. Jonsson, M. E. Rutherford, E. M. Escuariza, L. C. Smith, E. B. Herbold, J. Lind, M. C. Akin // Journal of Dynamic Behavior of Materials. — 2019. — Vol. 5. — P. 93–104. — DOI: 10.1007/s40870-019-00187-x.

65. ID09 Time-resolved diffraction [Электронный ресурс]. — URL: https://www.esrf.fr/home/UsersAndScience/Experiments/CBS/ID09.html.

66. ID24 is an energy dispersive EXAFS beamline optimized for time-resolved and extreme conditions x-ray absorption spectroscopy [Электронный ресурс]. — URL: https://www.esrf.fr/home/UsersAndScience/Experiments/MEx/ID24.html.

67. High energy density science: investigation of matter under extreme conditions using hard X-ray FEL radiation, e.g. probing dense plasmas [Электронный ресурс]. — URL: https://www.xfel.eu/facility/instruments/hed/index_eng.html.

68. Simultaneous 8.2 keV phase-contrast imaging and 24.6 keV X-ray diffraction from shock-compressed matter at the LCLS / F. Seiboth [et al.] // Appl. Phys. Lett.. Applied Physics Letters. — 2018. — Vol. 112, N 22. — P. 221907. — URL: http://xfel.tind.io/record/1664.

69. Conceptual Design Report: Dynamic Laser Compression Experiments at the HED Instrument of European XFEL : tech. rep. / U. Zastrau [et al.] ; EuXFEL staff. — 2017. — URL: http://xfel.tind.io/record/1069.

70. Introduction to I12 – JEEP [Электронный ресурс]. — URL: https://www.diamond.ac.uk/Instruments/Imaging-and-Microscopy/I12.html.

71. Оптимизация магнитной структуры источника синхротронного излучения четвертого поколения СКИФ в Новосибирске / Г. Н. Баранов, А. В. Богомягков, Е. Б. Левичев, С. В. Синяткин // Сибирский физический журнал. — 2020. — Т. 15, № 1. — DOI: 10.25205/2541-9447-2020-15-1-5-23.

72. ЦКП "СКИФ" Станция «Быстропротекающие процессы» [Электронный ресурс] / Э. Р. Прууэл, К. А. Тен, И. А. Рубцов, А. О. Кашкаров, В. М. Титов, Б. П. Толочко, А. И. Анчаров, А. С. Аракчеев, Л. И. Шехтман, В. В. Жуланов, В. М. Аульченко, Я. В. Ракшун, Я. В. Зубавичус. — URL: https://skif-wiki.biouml.org/images/7/78/Station_1-3.pdf (дата обр. 01.04.2022).

73. *Терещенко С. А.* Методы вычислительной томографии. — Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2004. — 302 с. — ISBN 5-9221-0551-5.

74. *Пикалов В. В.*, *Преображенский Н. Г.* Реконструктивная томография в газодинамике и физике плазмы. — Новосибирск: Наука, 1987. — 232 с.

75. *Козловский В. Н.* Информация в импульсной рентгенографии. — Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2006. — 167 с.

76. 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 // Сбор-

ник докладов. Физика экстремальных состояний вещества – 2003. — 2003. — С. 40–42.

77. *Марчук Г. И.* Методы вычислительной математики. — Москва: Наука, 1977. — 456 с.

78. *Galassi M., al.* GNU Scientific Library Reference Manual (3rd Ed.) [Электронный ресурс]. — ISBN 0954612078. — URL: http://www.gnu.org/software/gsl.

79. *Woodhead D. W.* Velocity of Detonation of a Tubular Charge of Explosive // Nature. — 1947. — Т. 160, № 8. — С. 644. — URL: https://www.nature.com/articles/160644a0.pdf.

80. *Woodhed D. W., Titman H.* Detonation phenomena in tubular charge of explosive // Explosivstoffe. — 1965. — Т. 13, № 5. — С. 113–123.

81. *Митрофанов В. В.* О сверхскоростной детонации в зарядах с продольными каналами // Физика горения и взрыва. — 1975. — № 1. — С. 73–81. — URL: https://www.sibran.ru/upload/iblock/a0f/a0fe50364803e9beead3bb0f50a206dc.pdf.

82. *Дубнов Л. В., Хотина Л. Д.* О механизме канального эффекта при детонации конденсированного ВВ // Физика горения и взрыва. — 1966. — № 4. — С. 97–104. — URL: https://www.sibran.ru/upload/iblock/422/422abd8146ed7f2f8cc9c1880b6780a7.pdf.

83. *Титов В. М., Фадеенко Ю. И., Титова Н. С.* Разгон твердых частиц кумулятивным взрывом // Доклады академии наук. — 1968. — Т. 180, № 5. — С. 1051–1052. — URL: http://www.mathnet.ru/links/606fbe450b9cc1267858a33ec68434aa/dan33912.pdf.

84. Высокоскоростное метание твердых тел / Л. А. Мержиевский, В. М. Титов, Ю. И. Фадеенко, Г. А. Швецов // Физика горения и взрыва. — 1987. — № 5. — С. 77–91. — URL: https://www.sibran.ru/upload/iblock/e46/e4633cdf8d55424eaf5626d3a614b59c.pdf.

85. *Лобанов В. Ф. and Фадеенко Ю. И.* Кумуляция продуктов детонации полого цилиндрического заряда // Физика горения и взрыва. — 1974. — № 1. — С. 119–124. — URL: https://www.sibran.ru/upload/iblock/362/3624af5ba505cf6a1307d52043a30943.pdf.

86. Детонация удлиненных зарядов с полостью / А. Загуменнов, Н. С. Титова, Ю. И. Фадеенко, В. П. Чистяков // Прикладная механика и техническая физика. — 1969. — № 2. — С. 79–83. — URL: https://sibran.ru/upload/iblock/2fa/2fabff3c79018ca6e9d5f2dd0f1603bc.pdf.

87. *Пряхин Г. В.*, *Титов В. М.*, *Швецов Г. А.* Исследование высокоскоростных потоков газа электромагнитным методом // Прикладная механика и техническая физика. — 1971. — № 3. — С. 137–140. — URL: https://sibran.ru/upload/iblock/39a/39acabc10f74fed8b8511360ec623053.pdf.

88. *Баранов Е. Г.*, *Клочко И. И.*, *Петелин Э. А.* О разлете продуктов взрыва в газокумулятивных зарядах // Физика горения и взрыва. — 1991. — № 6. — С. 127–131. — URL: https://sibran.ru/upload/iblock/779/779de074344f3528e29825161b32cad7.pdf.

89. *Сильвестров В. В.*, *Урушкин В. П.* Метод определения плотности высокоскоростных газовых струй // Динамика сплошных сред. — 1971. — № 7. — С. 125–129.

90. Физика взрыва / Ф. А. Баум, Л. П. Орленко, К. П. Станюкович, В. П. Челышев, Б. И. Шехтер. — Москва: Наука, 1975. — 704 с.

91. Детонационные волны в конденсированных средах / А. Н. Дремин, С. Д. Савров, В. С. Трофимов, К. К. Шведов. — М: Наука, 1970. — 164 с.

92. *Lee E. L.*, *Hornig H. C.*, *Kury J. W.* Adiabatic Expansion of High Explosive Detonation Products. — 1968. — 38 p. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/biblio/eq/jwl_1968.pdf.

93. *Годунов С. К.* Разностный метод расчета ударных волн // Успехи математических наук. — 1957. — Т. 12, 1(73). — С. 176–177. — URL: http://www.mathnet.ru/php/getFT.phtml?jrnid=rm&paperid=7539&what=fullt&option_lang=rus.

94. *Годунов С. К.* Численное решение многомерных задач газовой динамики. — 1976. — 400 с.

95. Уравнение состояния разреженных реагирующих газов [Электронный ресурс]. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/chem/index.html.

96. Уравнение состояния плотных реагирующих газов [Электронный ресурс]. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/chem/dense_index.html.

97. *Янилкин Ю. В.* Код ЭГИДА-2D для моделирования двумерных задач: Учебное пособие. В 2 томах. — 2008.

98. *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.

99. *Thiel M. van*, *Ree F. H.*, *Haselman L. C.* Accurate Determination of Pair Potentioal for a $C_wH_xN_yO_z$ System of Molecules: a Semiempirical Method : tech. rep. / Lawrence Livermore National Laboratory. — 1995.

100. *Ландау Л. Д.*, *Станюкович К. П.* Об изучении детонации конденсированных взрывчатых веществ // ДАН. — 1945. — Т. 46. — С. 399–406.

101. *Жерноклетов М. В.*, *Зубарев В. Н.*, *Телегин Г. С.* Изэнтропы расширения продуктов взрыва конденсированных ВВ // Прикладная механика и техническая физика. — 1969. — № 4. — С. 127–132. — URL: https://sibran.ru/upload/iblock/77a/77a4348f2e6ba2d276a000a3456600eb.pdf.

102. *Куропатенко В. Ф.* УРС продуктов детонации конденсированных ВВ // Численные методы механики сплошной среды. — 1977. — Т. 8, № 6. — С. 68–71.

103. *Mader C. L.* Detonation Properties of Condensed Explosives Computed Using the Becker-Kistiakowsky-Wilson Equation of State. — 1963. — 324 p. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/biblio/eq/LA_bkv_1963.pdf.

104. *Мейдер Ч.* Численное моделирование детонации. — 1985. — 384 с. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/biblio/eq/mader_1985.pdf.

105. *Fried L.*, *Suers P.* CHEETAH: A Next Generation Thermochemical Code. — 1994. — 24 p. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/biblio/eq/cheeta-2_jing_ping_lu.pdf.

106. *Зубарев В. Н.*, *Евстигнеев А. А.* Уравнения состояния продуктов взрыва конденсированных ВВ // Физика горения и взрыва. — 1984. — № 6. — С. 114–126. — URL: https://www.sibran.ru/upload/iblock/912/91246ec3d98a4e3327cb3aa85d8fb1fd.pdf.

107. *McGee B. C.and Hobbs M. L.*, *Baer M. R.* Exponential 6 Parameterization for the JCZ3-EOS. — 1998. — 74 p. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/biblio/eq/sandia_exp6_1998.pdf.

108. *Lu J. P.* Evaluation of the Thermochemical Code – CHEETAH 2.0 for Modelling Explosives Performance. — 2001. — 24 p. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/biblio/eq/cheeta-2_jing_ping_lu.pdf.

109. *Sapozhnikov F. A.and Dremov V. V.*, *Derbenev I. V.and Karavaev A. V.*, *Soulard L.* Molecular dynamics simulation of tatb-like explosive // AIP Conference Proceedings. — 2007. — Vol. 955. — P. 463–466. — DOI: 10.1063/1.2833102.

110. Quantum ESPRESSO is an integrated suite of Open-Source computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale. [Электронный ресурс]. — URL: https://www.quantum-espresso.org/.

111. Equation of state for CO and CO2 fluids and their application on decarbonation reactions at high pressure and temperature / Y. Li, L. Vočadlo, A. Edgington, J. P. Brodholt // Chemical Geology. — 2021. — Т. 559. — С. 119918. — ISSN 0009-2541. — DOI: https://doi.org/10.1016/j.chemgeo.2020.119918. — URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009254120304575.

112. Quantum molecular dynamic simulations of warm dense carbon monoxide / Y. Zhang, C. Wang, D. Li, P. Zhang // The Journal of Chemical Physics. — 2011. — Т. 135, № 6. — С. 064501. — DOI: 10.1063/1.3624920.

113. *Ломоносов И. В.*, *Фортов С. В.* Широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния вещества для численного моделирования высокоэнергетических процессов // Теплофизика высоких температур. — 2017. — Т. 55, № 4. — С. 596–626. — DOI: 10.7868/S0040364417040111.

114. SESAME Database. Equation-of-State tabular data for the thermodynamic properties of materials [Электронный ресурс]. — URL: https://www.lanl.gov/org/ddste/aldsc/theoretical/physics-chemistry-materials/sesame-database.php.

115. *Котомин А.*, *Душенок С.*, *Козлов А.* Эмпирические методы расчета взрывчатых веществ и композиций. — 2020. — 383 с. — ISBN 978-5-8114-5263-7.

116. Уравнения состояния продуктов детонации взрывчатых веществ / В. В. Валько, О. П. Образ, В. А. Гасилов, В. С. Соловьёва, Н. О. Савенко. — 2021. — 38 с. — URL: https://keldysh.ru/papers/2021/prep2021_51.pdf.

117. Evaluation of various theoretical equations of state used in calculation of detonation properties / F. Charlet, M. L. Turkel, J. F. Danel, L. Kazandjian // Journal of Applied Physics. — 1998. — Vol. 84, N 8. — P. 4227–4238. — DOI: 10.1063/1.368640.

118. *Глушко В. П.* Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Тома I, II, II, IV. — Москва: Наука, 1978.

119. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Том V. Статистическая физика. Часть 1. — Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2001. — 592 с. — ISBN 5-02-014423-1.

120. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Тома V, VI [Электронный ресурс] / под ред. В. С. Иориш. — URL: http://www.chem.msu.su/Zn.

121. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. База данных Ивтантермо [Электронный ресурс]. — URL: http://www.chem.msu.su/rus/handbook/ivtan.

122. 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. — Т. 946. — С. 012120. — DOI: 10.1088/1742-6596/946/1/012120.

123. *Сталл Д., Вестрам Э., Зинке Г.* Химическая термодинамика органических соединений. — Москва: Мир, 1971. — 807 с.

124. *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.

125. *Vasilev A. A., Valishev A. I., Vasilev V. A.* Detonation hazards of hydrogen mixtures // Proc. of the colloq. on gas, vapor, hybrid and fuel – air explosions. — 1998. — С. 392–395.

126. *Michels H. J.* Marginal Detonation in Hydrocarbon – Oxygen Mixtures : Thesis submitted for the degree of Doctor of Philosophy / Michels Henricus Josephus. — Imperial College of Science, Technology, 1967.

127. *Michels H. J.*, *Munday G.*, *Ubbelohde A. R.* Detonation limits in mixtures of oxygen and homologous hydrocarbons // Proceedings of the Royal Society A. — 1970. — Т. 319. — С. 461–477.

128. *Wagner H. G.* Soot formation in combustion // Proc. Seventeenth Symp. (Intern.) on Combustion. — Pittsburgh: The Combustion Inst., 1979. — С. 3–19.

129. *Dorge K. J.*, *Stephan F.*, *Wagner H. G.* Acetylene detonations near the upper limit of detonability // Proc. 17th Intern. Colloquium on the Dynamics of Explosion and Reactive Systems (ICDERS-1999), July 25–30. — Univ. Heidelberg IWR, 1999.

130. Исследование газовой детонации переобогащенных смесей углеводородов с кислородом / И. С. Батраев, В. Ю. Васильев А. А. Ульяницкий, А. А. Штерцер, Д. К. Рыбин // Физика горения и взрыва. — 2018. — Т. 54, № 2. — С. 89–97. — DOI: 10.15372/FGV20180210.

131. *Breton J.* Recherches sur la detonation des melanges gazeux. — Theses Faculte des Sciences. Univ. Nancy, 1936.

132. *Васильев А. А.*, *Пинаев А. В.* Образование углеродных кластеров в волнах горения и детонации газовых смесей // Физика горения и взрыва. — 2008. — Т. 44, № 3. — С. 81–94.

133. *Munday G.*, *Ubbelohde A. R.*, *Wood I. F.* Marginal detonation in cyanogen-oxygen mixtures // Proceedings of the Royal Society A. — 1968. — Т. 306, № 485. — С. 179–184.

134. *Прууэл Э. Р.*, *Васильев А. А.*, *Кашкаров А. О.* Метод расчета равновесных ударных и детонационных волн в реагирующих газах.

Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2018660109. — 2018.

135. 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.

136. *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.

137. *KATAOKA Y.*, *YAMADA Y.* Phase Diagram for a Lennard-Jones System Obtained through Constant-Pressure Molecular Dynamics Simulations // Journal of Computer Chemistry, Japan. — 2014. — Т. 13, № 5. — С. 257–262. — DOI: 10.2477/jccj.2014-0016.

138. 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.

139. *Замалин В. М.*, *Норман Г. Э.*, *Филинов В. С.* Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. — Москва: Наука, 1977. — 229 с.

140. *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.

141. *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.

142. *Liu L.-g.* Compression and phase behavior of solid CO_2 to half a megabar // Earth and Planetary Science Letters. — 1984. — Т. 71, № 1. — С. 104–110. — ISSN 0012-821X. — DOI: 10.1016/0012-821X(84)90056-6. — URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0012821X84900566.

143. *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).

144. LASL SHOCK HUGONIOT DATA / ed. by S. P. Marsh. — 1980. — 658 p. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/chem/doc/lasl_shock.pdf.

145. *Olijnyk H.* High pressure x-ray diffraction studies on solid N_2 up to 43.9 GPa // The Journal of Chemical Physics. — 1990. — Т. 93, № 12. — С. 8968–8972. — DOI: 10.1063/1.459236.

146. High P-T transformations of nitrogen to 170 GPa / E. Gregoryanz, A. F. Goncharov, C. Sanloup, M. Somayazulu, H.-k. Mao, R. J. Hemley // The Journal of Chemical Physics. — 2007. — Т. 126, № 18. — С. 184505. — DOI: 10.1063/1.2723069.

147. 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. — Т. 94, № 3. — С. 2244–2257. — DOI: 10.1063/1.459895.

148. *Fried L. E.*, *Howard W. M.* An accurate equation of state for the exponential-6 fluid applied to dense supercritical nitrogen // The Journal of Chemical Physics. — 1998. — Т. 109, № 17. — С. 7338–7348. — DOI: 10.1063/1.476520.

149. *Winey J. M.*, *Gupta Y. M.* Complete equation of state for shocked liquid nitrogen: Analytical developments // The Journal of Chemical Physics. — 2016. — Т. 145, № 5. — С. 054504. — DOI: 10.1063/1.4959770.

150. *Ross M.*, *Ree F. H.* Repulsive forces of simple molecules and mixtures at high density and temperature // The Journal of Chemical Physics. — 1980. — Т. 73, № 12. — С. 6146–6152. — DOI: 10.1063/1.440106.

151. The dissociation and equation of state of dense fluid oxygen at high pressures and high temperatures / Q. F. Chen, L. C. Cai, Y. Zhang, Y. J. Gu // The Journal of Chemical Physics. — 2008. — Т. 128, № 10. — С. 104512. — DOI: 10.1063/1.2837480.

152. Shock compression of liquid carbon monoxide and methane to 90 GPa (900 kbar) / W. J. Nellis, F. H. Ree, M. van Thiel, A. C. Mitchell // The Journal of Chemical Physics. — 1981. — Т. 75, № 6. — С. 3055–3063. — DOI: 10.1063/1.442401. — eprint: https://doi.org/10.1063/1.442401. — URL: https://doi.org/10.1063/1.442401.

153. *Зубарев В. Н.*, *Телегин Г. С.* Ударная сжимаемость жидкого азота и твердой углекислоты // Доклады Академии наук. — 1962. — Т. 142, № 2. — С. 309–312.

154. Equation of state of shock-compressed liquids: Carbon dioxide and air / W. J. Nellis, A. C. Mitchell, F. H. Ree, M. Ross, N. C. Holmes, R. J. Trainor, D. J. Erskine // The Journal of Chemical Physics. — 1991. — Т. 95, № 7. — С. 5268–5272. — DOI: 10.1063/1.461665.

155. *Schott D. G. L.* Shock-compressed carbon dioxide: Liquid measurements and comparisons with selected models // High Pressure Research. — 1991. — Т. 6, № 3. — С. 187–200. — DOI: 10.1080/08957959108203209.

156. Ab initio based equation of state of dense water for planetary and exoplanetary modeling / S. Mazevet, A. Licari, G. Chabrier, A. Potekhin //

Astronomy and Astrophysics. — 2019. — T. 621. — A128. — DOI: 10.1051/0004-6361/201833963.

157. *Bordzilovskii S. A.*, *Karakhanov S. M.*, *Khishchenko K. V.* Thermal Radiation from Water behind the Reflected Shock Wave // Combust Explos Shock Waves. — 2018. — Vol. 54, N 6. — P. 712–719. — DOI: 0.15372/FGV20180611.

158. The temperature of shock-compressed water / G. A. Lyzenga, T. J. Ahrens, W. J. Nellis, A. C. Mitchell // The Journal of Chemical Physics. — 1982. — Vol. 76, N 12. — P. 6282–6286. — DOI: 10.1063/1.443031.

159. Solid ammonia at high pressure: A single-crystal x-ray diffraction study to 123 GPa / F. Datchi, S. Ninet, M. Gauthier, A. M. Saitta, B. Canny, F. Decremps // Phys. Rev. B. — 2006. — Май. — Т. 73, вып. 17. — С. 174111. — DOI: 10.1103/PhysRevB.73.174111. — URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.174111.

160. *Dick R. D.* Shock compression data for liquids. III. Substituted methane compounds, ethylene glycol, glycerol, and ammonia // The Journal of Chemical Physics. — 1981. — Vol. 74, N 7. — P. 4053–4061. — DOI: 10.1063/1.441586.

161. *Mitchell A. C.*, *Nellis W. J.* Equation of state and electrical conductivity of water and ammonia shocked to the 100 GPa (1 Mbar) pressure range // The Journal of Chemical Physics. — 1982. — Vol. 76, N 12. — P. 6273–6281. — DOI: 10.1063/1.443030.

162. *Bauer P. A.* Contribution of L'Etude De La Detonation De Melanges Explosifs Gazeux A Pression Initiale Elevvee : Диссертация на соискание степени кндидата физико-математических наук / Bauer P. A. — Universite De Pointiers, 1985. — 120 с.

163. 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.

164. *Воскобойников И. М.*, *Апин 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.

165. Detonation Pressure of an Emulsion Explosive Sensitized by Polymer Microballoons / A. S. Yunoshev, S. A. Bordzilovskii, M. S. Voronin, S. M. Karakhanov, S. N. Makarov, A. V. Plastinin // Combustion, Explosion, and Shock Waves. — 2019. — Т. 55, № 4. — С. 426–433. — DOI: 10.1134/S0010508219040087.

166. Detonation temperature of an emulsion explosive with a polymer sensitizer / S. M. Bordzilovskii S. A.and Karakhanov, A. V. Plastinin, S. I. Rafeichik, A. S. Yunoshev // Combustion, Explosion, and Shock Waves. — 2017. — Т. 53, № 6. — С. 730–737. — DOI: 10.1134/S0010508217060156. — URL: https://link.springer.com/content/pdf/10.1134/S0010508217060156.pdf.

167. *Гогуля М. Ф.*, *Бражников М. А.* Температуры продуктов детонации конденсированных взрывчатых веществ. I. Твердые ВВ // Химическая физика. — 1994. — Т. 13, № 1. — С. 52–63.

168. *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.

169. Физика взрыва. Т. 1. — Москва : Физматлит, 2004.

170. LASL EXPLOSIVE PROPERTY DATA / ed. by T. R. Gibbs, P. A. — 1980. — 471 p. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/chem/doc/lasl_detonation.pdf.

171. *Tanaka K.* Detonation Properties of Condensed Explosives Computed Using the Kihara-Hikita-Tanaka Equation of State. — 1983. — 194 p. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/chem/doc/tanaka.pdf.

172. Параметры детонации прессованных зарядов бензотрифуроксана / А. Ю. Долгобородов, М. А. Бражников, М. Н. Махов, Н. Е. Сафронов, В. Г. Кириленко // Физика горения и взрыва. — 2013. — Т. 49, № 6. — С. 112–120. — URL: https://www.sibran.ru/upload/iblock/6d7/6d737533472f9f02379309ee8acaff1f.pdf.

Приложение А

Параметры модели уравнения состояния

Для определения давления и внутренней энергии плотного газа взаимодействующих молекул с известных 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:

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

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

где r модуль расстояния; ε, b и α параметры потенциала взаимодействия между двумя рассматриваемыми молекулами.

Параметры парного потенциала для используемых химических компонент приведены в таблице А.1.

Таблица А.1 – Параметры парного потенциала exp-6 для химических соединений используемых в модели.

Name	b, 10^{-10} m	ε/k, K	α
Al	2.99702	2406.02	9.6
Ar	3.83664	113.233	13.5
C	2.71349	5278.57	14
CH_4	4.20422	143.308	13
CO	4.07397	101.09	13.5
CO_2	4.13705	240.158	13.5
Fe	2.6066	2255.64	11
H_2	3.65274	24.9474	12
H	2.89918	12.4737	14
H_2O	3.36546	194.586	12
He	3.50706	3.90977	13.5
Kr	4.11135	157.368	13.5
Mg	3.39709	1729.32	9.4
N_2	4.06302	94.8872	14
N	2.84916	105.263	12
NH_3	3.61752	304.812	12
NO	3.92684	105.556	14
Ne	3.15144	33.3835	14
O_2	3.80726	116.226	14
O	2.76878	232.451	11
OH	3.2167	272.289	14
Sn	3.44224	1842.11	11
Xe	4.47594	217.895	13.5

Приложение Б

Калибровка модели. Параметры ударных волн

В разделе представлено сравнение рассчитанных по модели параметров состояния однокомпонентных составов с экспериментальными данными NIST, сжатия в алмазных наковальнях и в ударных волнах.

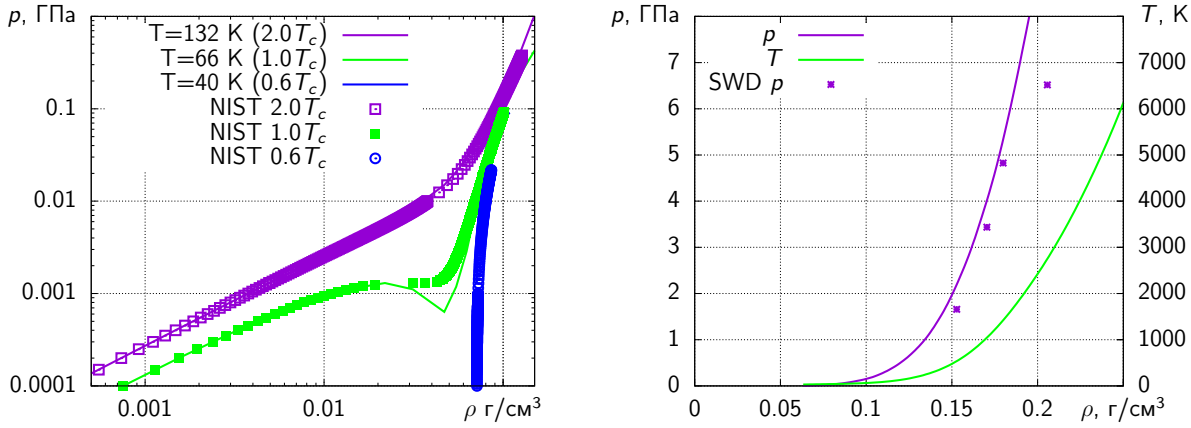
Для построения ударной адиабаты численно решалось нелинейное уравнение Гюгонио

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

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

Б.1 H_2

Сравнение модели уравнения состояния фиксированного состава H_2 (сплошные линии) с экспериментальными данными (символы) (рис. Б.1).



а) б)

Рисунок Б.1 – а – зависимости давления от плотности флюида H_2 вдоль изотерм, NIST – [124]. б – ударная адиабата сжиженного водорода: SWD – [143]; начальное состояние: $\rho_0 = 0.0308$ г/см^3, $T_0 = 33$ K.

Б.2 N_2

Сравнение модели уравнения состояния реагирующего состава на основе N_2 (сплошные линии) с экспериментальными данными (символы) (рис. Б.2, Б.3): изотермическое сжатие до давления 2 ГПа [124], сжатие в алмазных наковальнях [145, 146], ударная адиабата [143, 147]. Модели уравнения состояния других авторов [148, 149].

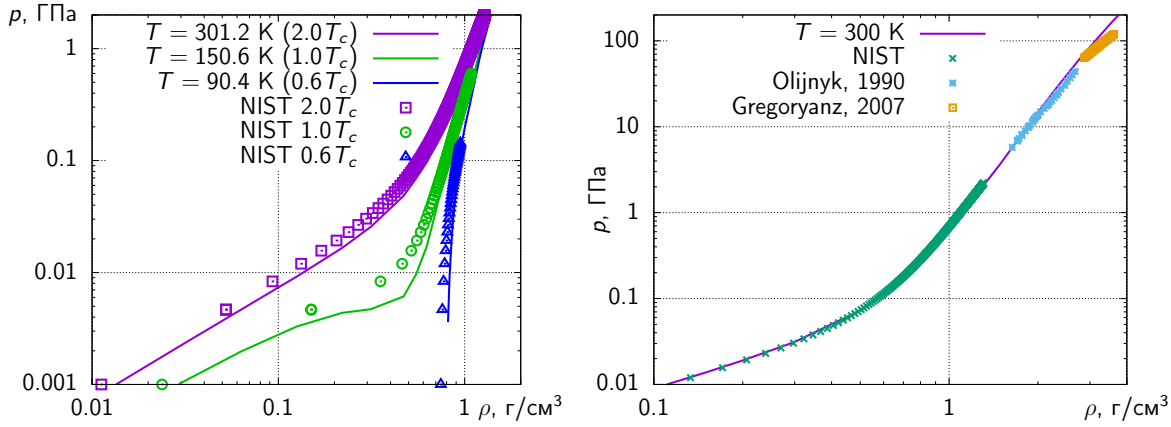


Рисунок Б.2 – Зависимости давления от плотности флюида N_2 вдоль изотерм: NIST – [124], Olijnyk – [145], Gregoryanz – [146].

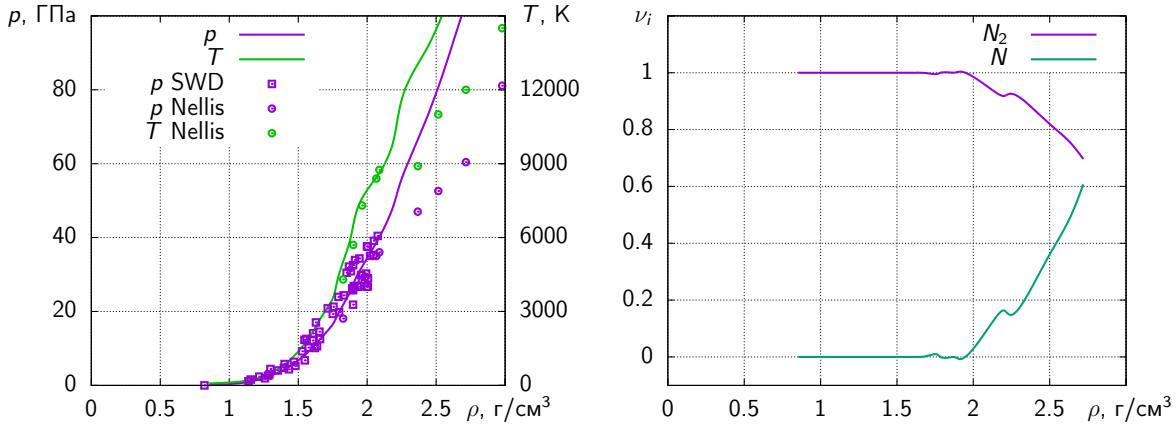


Рисунок Б.3 – Ударная адиабата сжиженного азота: SWD – [143], Nellis – [147]. Начальное состояние: $\rho_0 = 0.808$ г/см^3, $T_0 = 77.4$ K.

Б.3 O_2

Сравнение модели уравнения состояния реагирующего состава на основе O_2 (сплошные линии) с экспериментальными данными (символы) (рис. Б.4, Б.5): изотермическое сжатие до 0.1 ГПа[124], ударная адиабата сжиженного кислорода [143]. Модели уравнения состояния [150, 151].

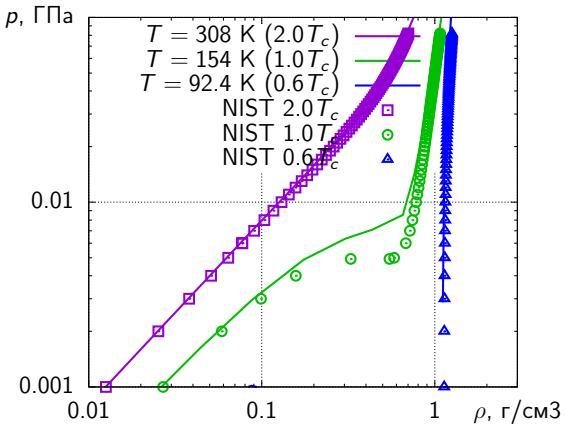


Рисунок Б.4 – Зависимости давления от плотности флюида O_2 вдоль изотерм: NIST – [124].

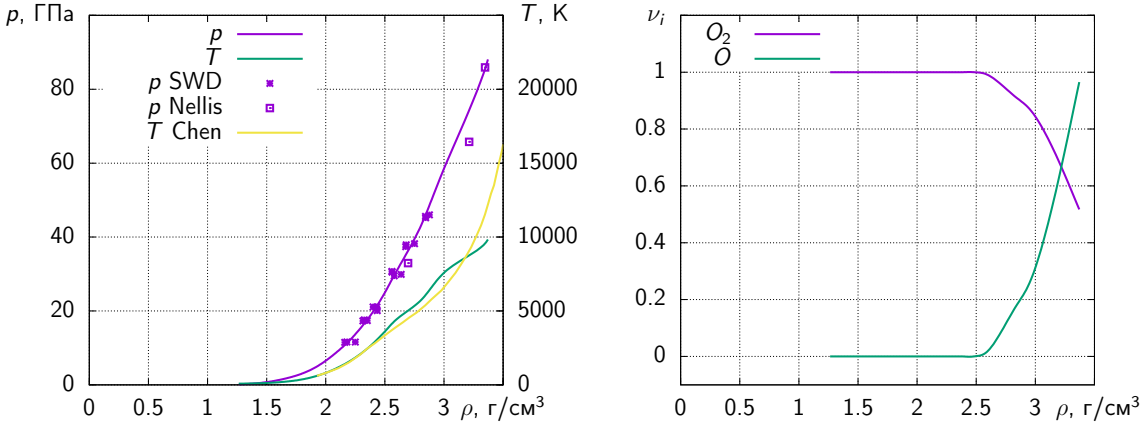


Рисунок Б.5 – Ударная адиабата сжиженного кислорода: SWD – [143], Chen – [151], Ree – [150]. Начальное состояние: $\rho_0 = 1.202$ г/см^3, $T_0 = 77$ K.

Б.4 CO

Сравнение модели уравнения состояния реагирующего состава на основе CO (сплошные линии) с экспериментальными данными (символы) (рис. Б.6, Б.7): изотермическое сжатие [124], ударная адиабата сжиженного монооксида углерода [143].

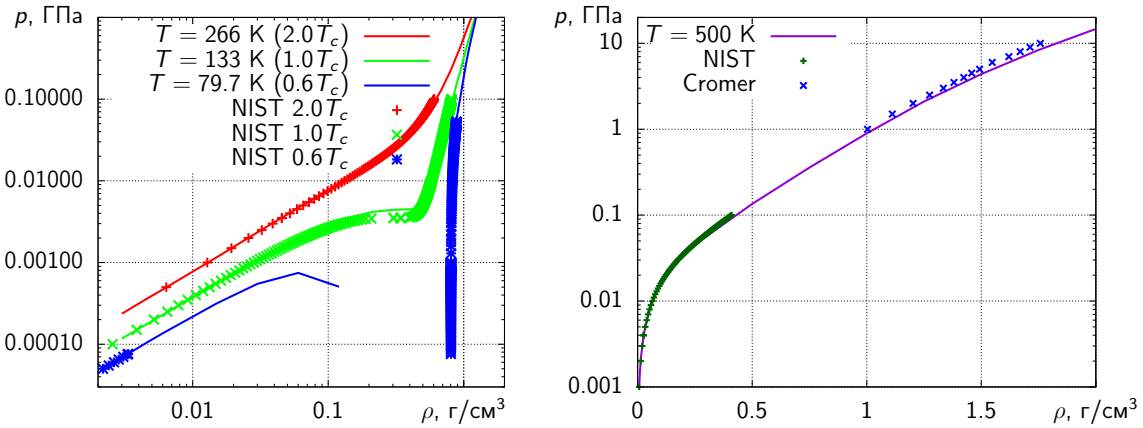


Рисунок Б.6 – Зависимости давления от плотности флюида CO вдоль изотерм: NIST – [124].

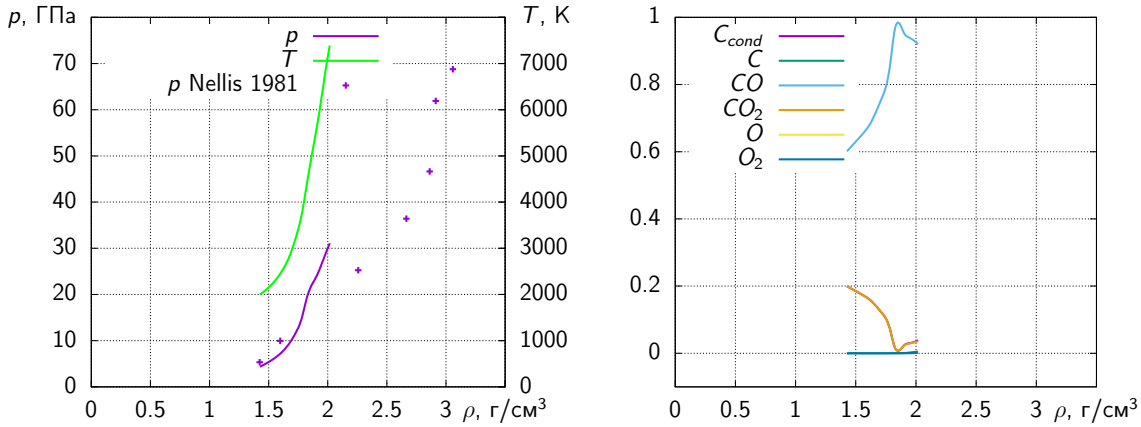


Рисунок Б.7 – Ударная адиабата сжиженного CO: Nellis – [152]. Начальное состояние: $\rho_0 = 1.202$ г/см^3, $T_0 = 77$ K.

Б.5 CO_2

Сравнение модели уравнения состояния реагирующего состава на основе CO_2 (сплошные линии) с экспериментальными данными (символы) (рис. Б.8, Б.9): изотермическое сжатие [124, 142], ударная адиабата [153–155].

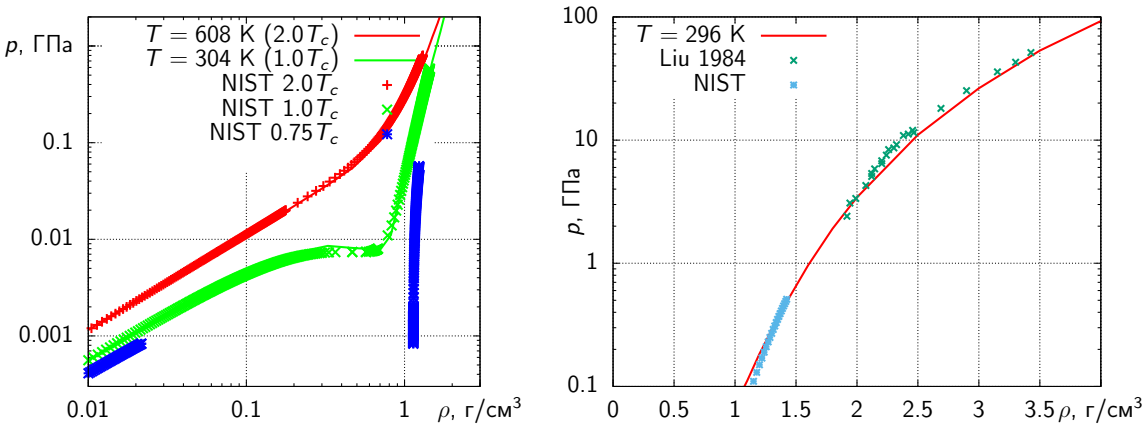


Рисунок Б.8 – Зависимости давления от плотности флюида CO_2 вдоль изотерм: NIST – [124], Liu – [142].

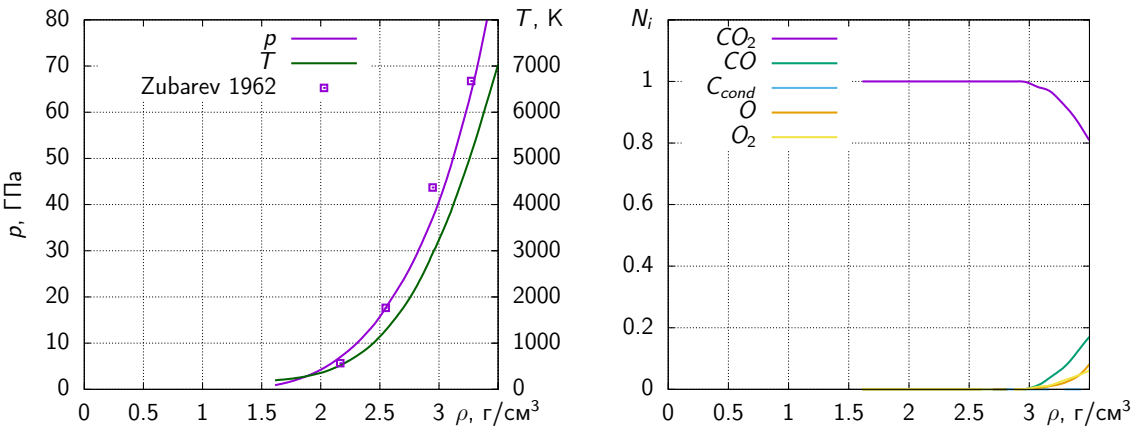


Рисунок Б.9 – Ударная адиабата твердого CO_2: Zubarev – [153]. Начальное состояние: $\rho_0 = 1.54$ г/см^3, $T_0 = 196$ K.

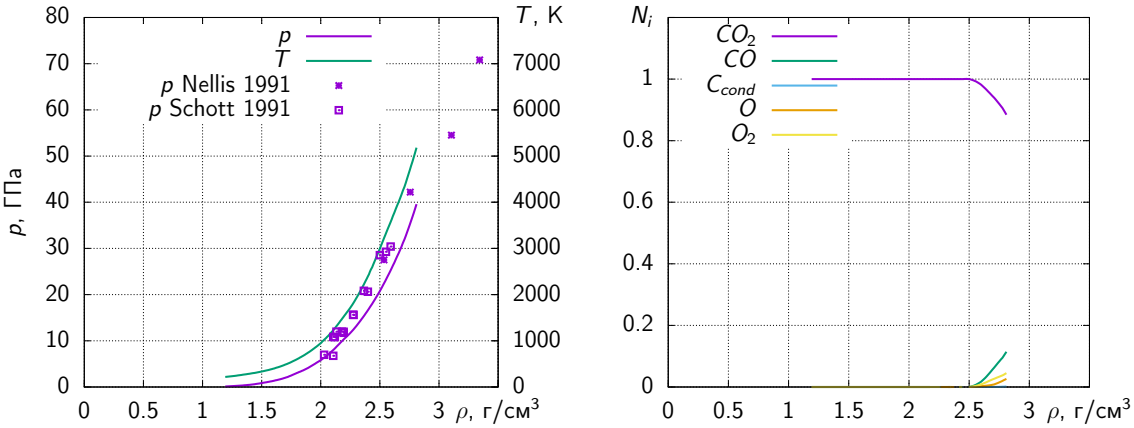


Рисунок Б.10 – Ударная адиабата жидкого CO_2: Nellis – [154], Schott – [155]. Начальное состояние: $\rho_0 = 1.172$ г/см^3, $T_0 = 218$ K, $p_0 = 7e5$ Па.

Б.6 H_2O

Сравнение модели уравнения состояния реагирующего состава на основе H_2O (сплошные линии) с экспериментальными данными (символы) (рис. Б.11, Б.12): изотермическое сжатие [124, 156], ударная адиабата [143, 157, 158].

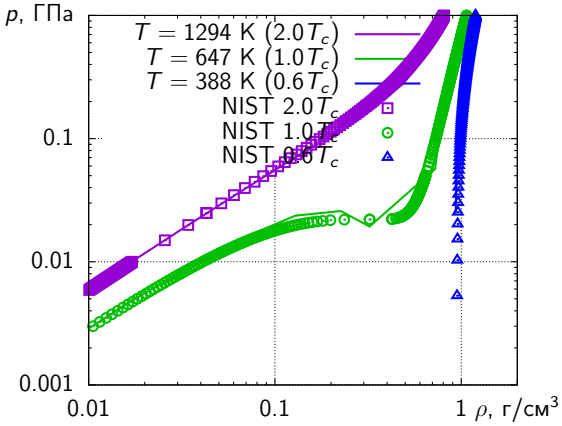


Рисунок Б.11 – Зависимости давления от плотности флюида H_2O вдоль изотерм: NIST – [124].

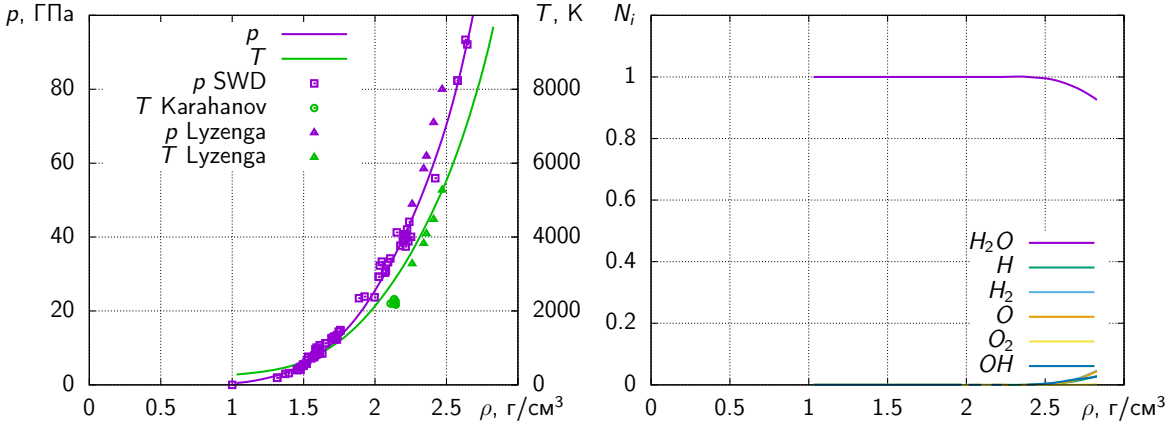


Рисунок Б.12 – Ударная адиабата H_2O: SWD – [143], Karahanov – [157], Lyzenga – [158]. Начальное состояние: $\rho_0 = 0.994$ г/см^3, $T_0 = 300$ K.

Б.7 CH_4

Сравнение модели уравнения состояния фиксированного состава CH_4 (сплошные линии) с экспериментальными данными (символы) (рис. Б.13, Б.14): изотермическое сжатие [124], ударная адиабата [143].

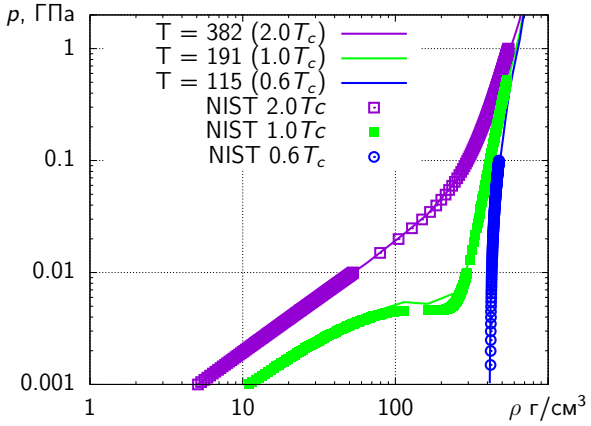


Рисунок Б.13 – Зависимости давления от плотности флюида CH_4 вдоль изотерм: NIST – [124].

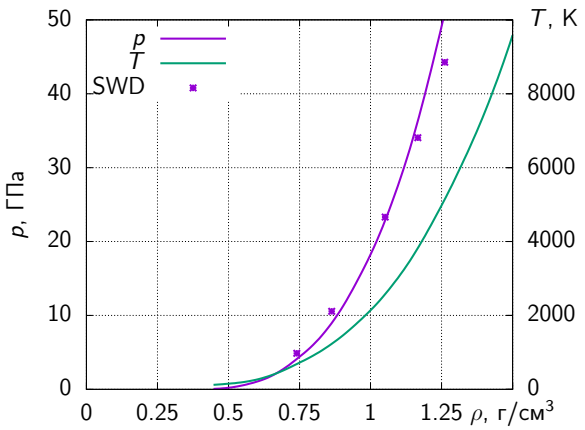


Рисунок Б.14 – Ударная адиабата сжиженного CH_4: SWD – [143]. Начальное состояние: $\rho_0 = 0.423$ г/см^3, $T_0 = 111.46$ K.

Б.8 NH_3

Сравнение модели уравнения состояния фиксированного состава NH_3 (сплошные линии) с экспериментальными данными (символы) (рис. Б.15, Б.16): изотермическое сжатие [124, 159], ударная адиабата [143, 160, 161].

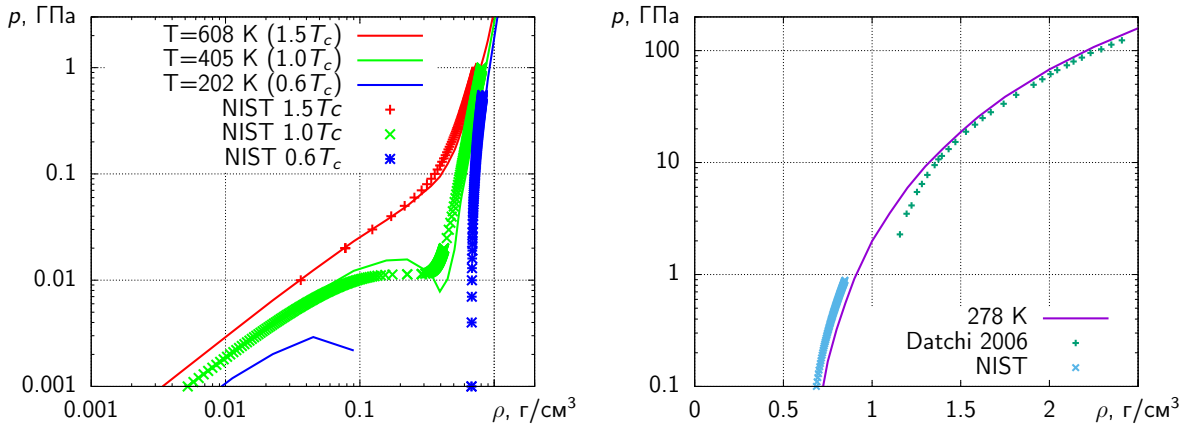


Рисунок Б.15 – Зависимости давления от плотности флюида NH_3 вдоль изотерм: NIST – [124], Datchi –[159].

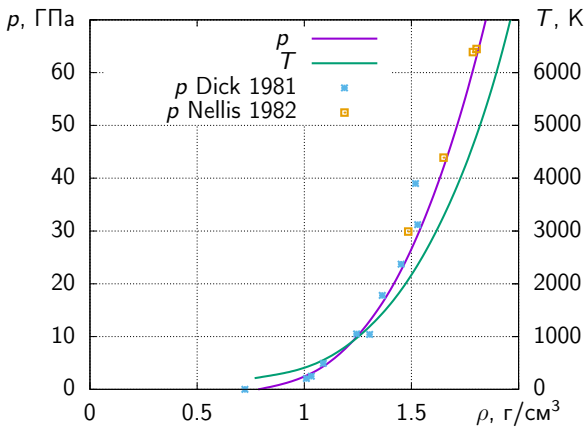


Рисунок Б.16 – Ударная адиабата сжиженного NH_3: Dick – [160], Nellis – [161]. Начальное состояние: $\rho_0 = 0.726$ г/см^3, $T_0 = 203$ K.

Приложение В

Калибровка модели. Параметры детонации Чепмена-Жуге

В разделе приведено сравнение вычисленных параметров детонации конденсированных взрывчатых веществ с экспериментальными данными – зависимости скорости волны, давления, химического состава и дифференциального показателя адиабаты в точке Чепмена-Жуге от начальной плотности. Для одного значения начальной плотности приведены параметры равновесной адиабаты разгрузки от условий Чепмена-Жуге до давления 10^6 Па.

Для определения параметров детонации Чепмена-Жуге, строилась ударная адиабата продуктов взрыва 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. Начальная плотность энергии e_0 вычислялась из стандартной энтальпии образования исходных компонент детонирующей смеси.

В рамках модели для вычисления параметров детонации необходимо задать энтальпии образования горючих компонент, элементный состав и плотность заряда. Используемые значения параметров приведены в таблице В.1.

Таблица В.1 – Значения термодинамических характеристик горючих компонент и смесей.

Наименование	ρ_0, г/см^3	μ, г/моль	$\Delta_f H^\circ_{cond}$, МДж/кг	$\Delta_f H^\circ_{cond}$, МДж/моль	Элементный состав
Нитрат аммония	1.2	80.0	-4.570	-0.3657	H4 N2 O3
Эмульсионное ВВ	1.1	–	-6.17	–	C6 H98 N30 O59
Тэн	1.7	316.1	-1.704	-0.5385	C5 H8 N4 O12
Гексоген	1.75	222.1	0.277	0.0615	C3 H6 N6 O6
Октоген	1.85	296.1	0.253	0.075	C4 H8 N8 O8
Тнт	1.6	227.1	-0.328	-0.0745	C7 H5 N3 O6
Тнт50/гексоген50	1.67	–	-0.256	–	C92 H102 N84 O111
Татб	1.8	258.1	-0.570	-0.147	C6 H6 N6 O6
Бтф	1.8	252.1	2.304	0.5807	C6 N6 O6
Гав (cl20)	1.9	438.1	0.861	0.377411	C6 H6 N12 O12
Углерод (графит)	1.9	12.0	0.0	0.0	C1
Вода	1.0	18.0	-15.871	-0.28583	H2 O1
Al_{cond}	2.7	27.0	0.0	0.0	Al1
Полиэтилен	0.9	14.0	-2.073	-0.02908	C1 H2
Полиизобутилен	0.95	56.1	-1.599	-0.089705	C4 H8
Стеариновая кислота	0.95	284.5	-3.024	-0.8602	C18 H36 O2

B.1 Аммиачная селитра

Аммиачная селитра ($NH_4[NO_3]$, нитрат аммония, ammonium nitrate, $\Delta_f H^\circ_{cond} = -4.570$ МДж/кг [124]).

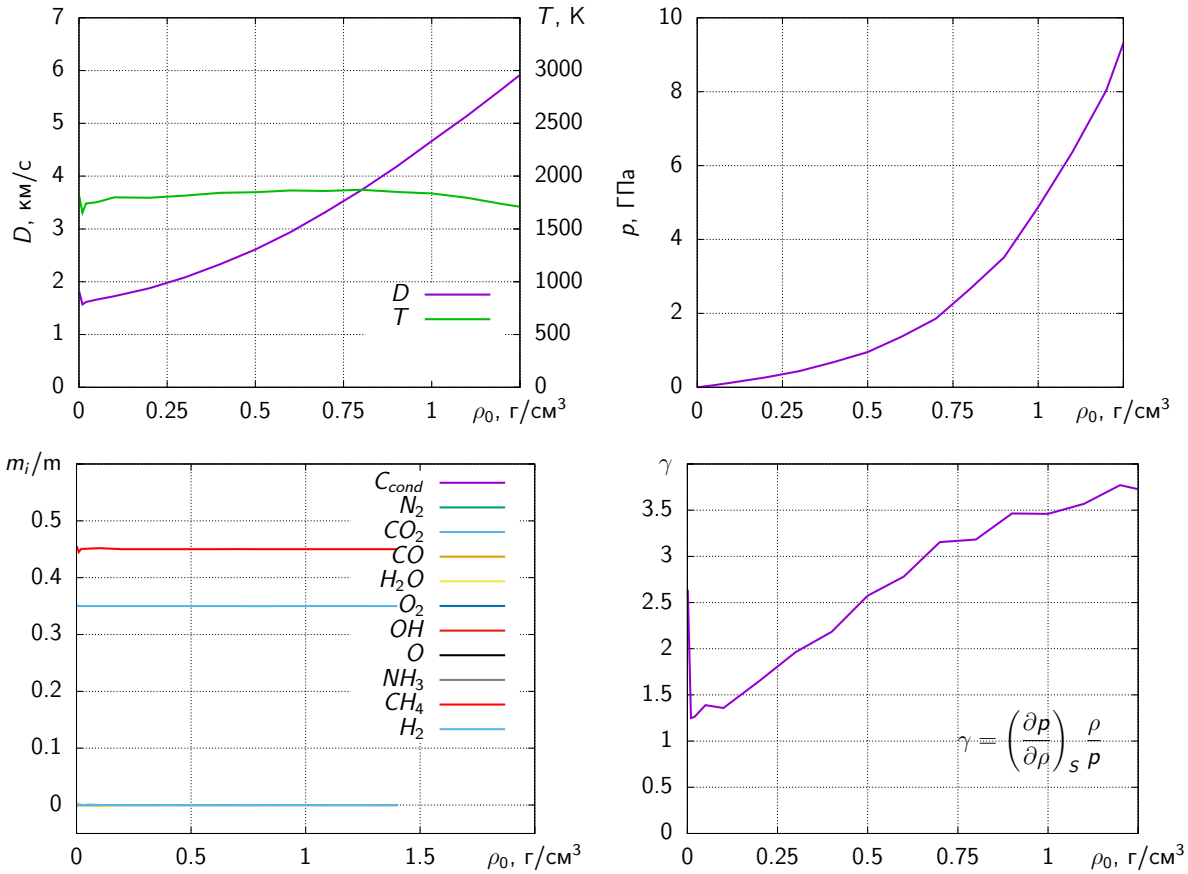


Рисунок B.1 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности.

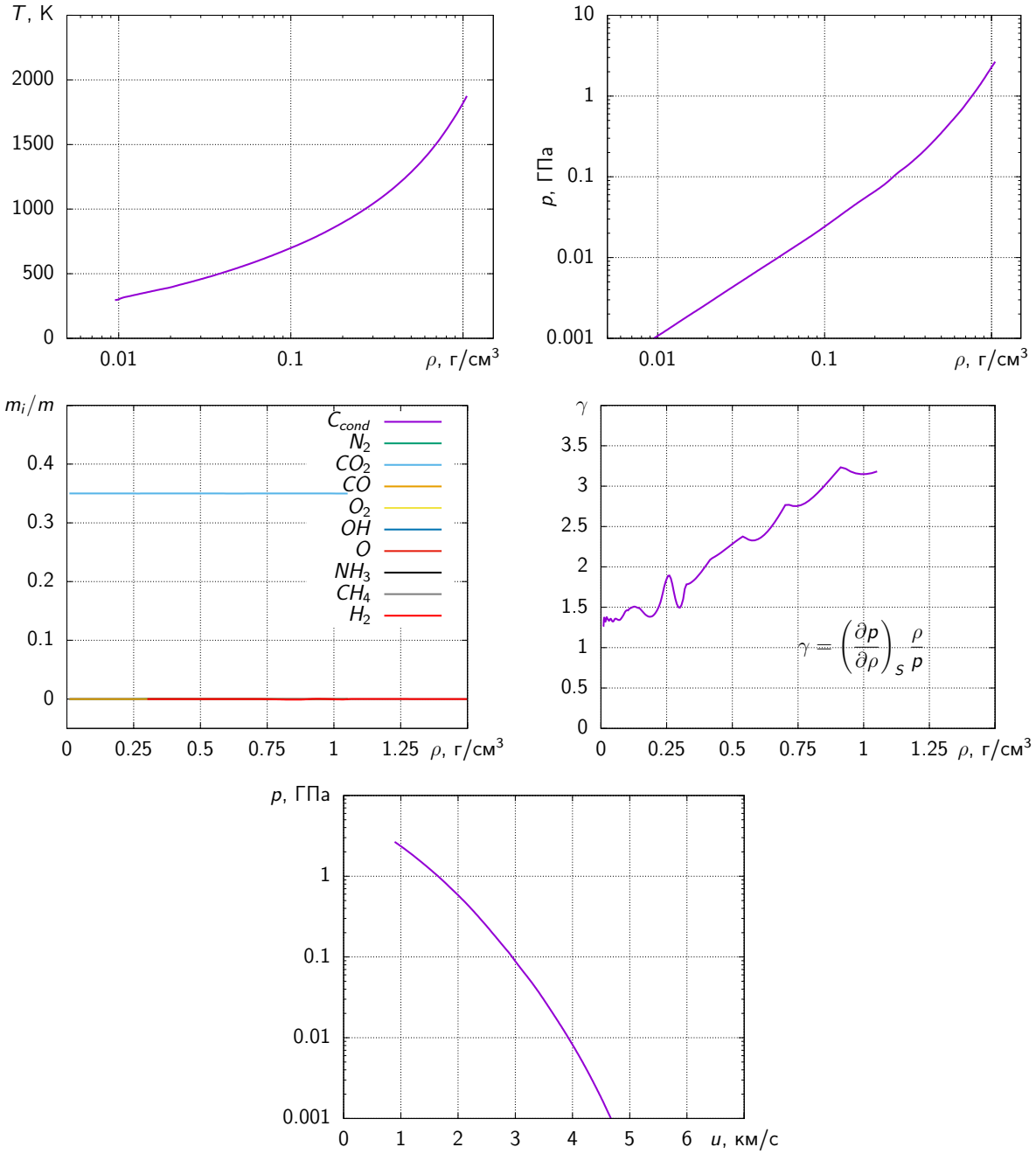


Рисунок В.2 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации заряда с начальной плотностью $\rho_0 = 1$ г/см^3.

B.2 Эмульсионное ВВ на основе аммиачной селитры

Смесь на основе аммиачной селитры. Массовые доли компонент: 79 нитрат аммония, 15 вода, 6 стеариновая кислота ($\Delta_f H^\circ_{cond} = -6.172$ МДж/кг).

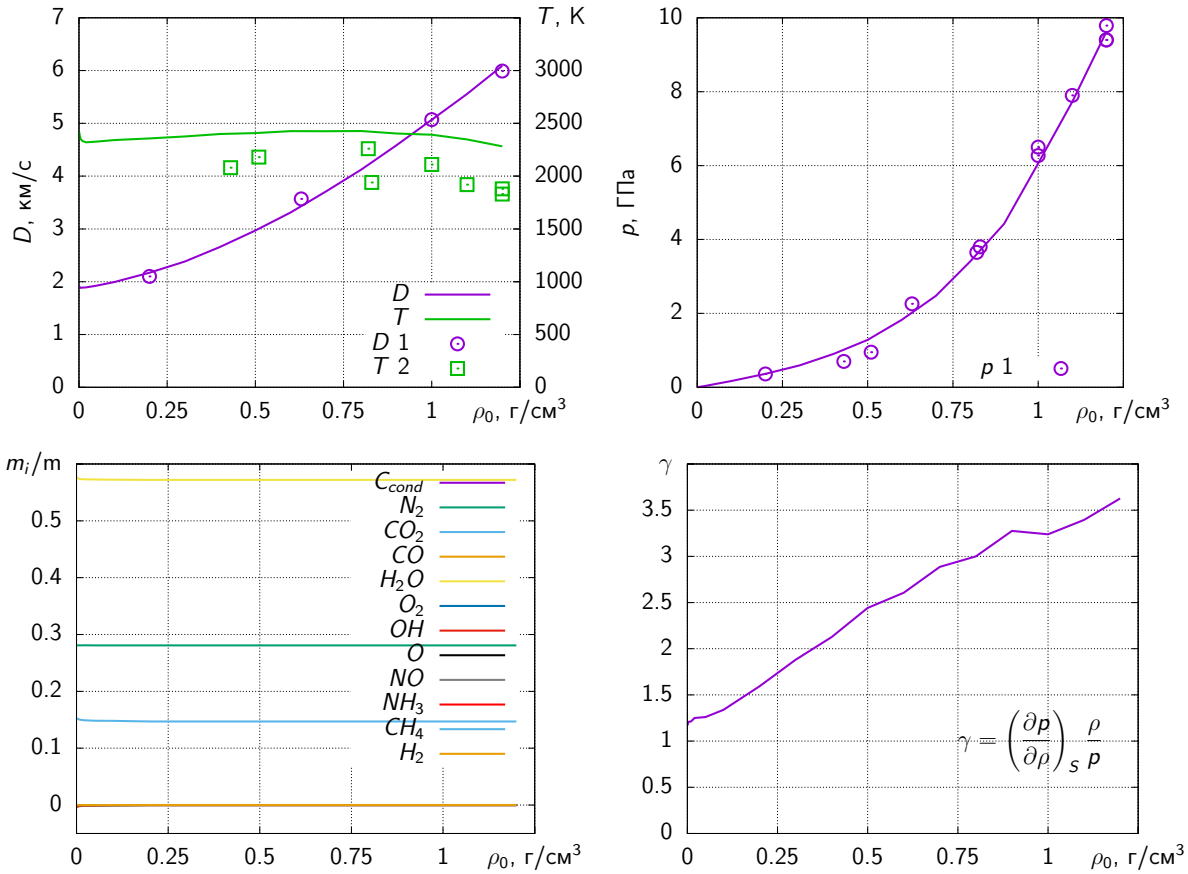


Рисунок B.3 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности. Сплошные линии – вычисления по модели, 1 – данные работы [165], 2 – [166].

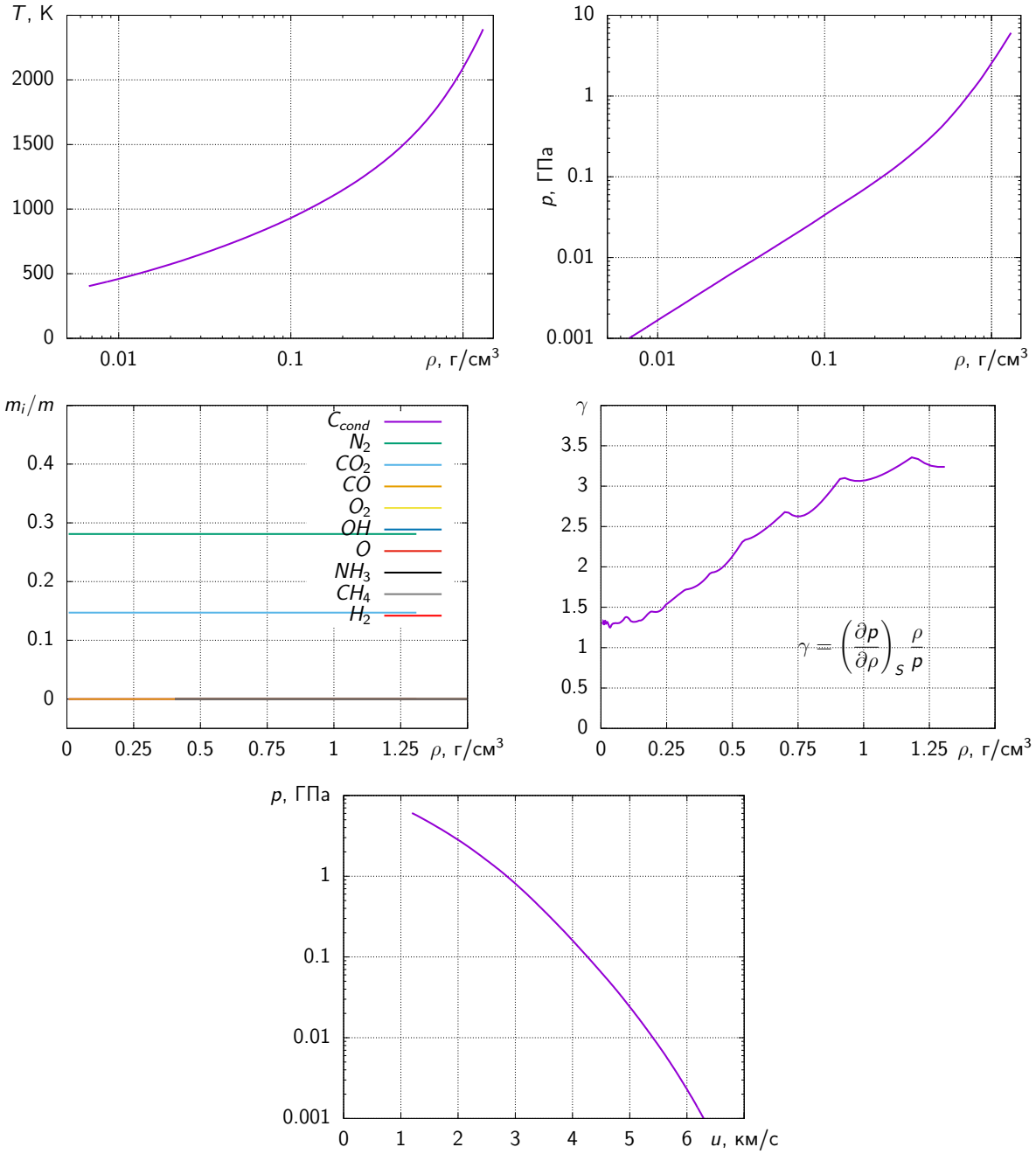


Рисунок В.4 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации заряда с начальной плотностью $\rho_0 = 1$ г/см^3.

B.3 Тэн

Тэн ($C_5H_8N_4O_{12}$, пентаэритриттетранитрат, $\Delta_f H^\circ_{cond} = -1.704$ МДж/кг).

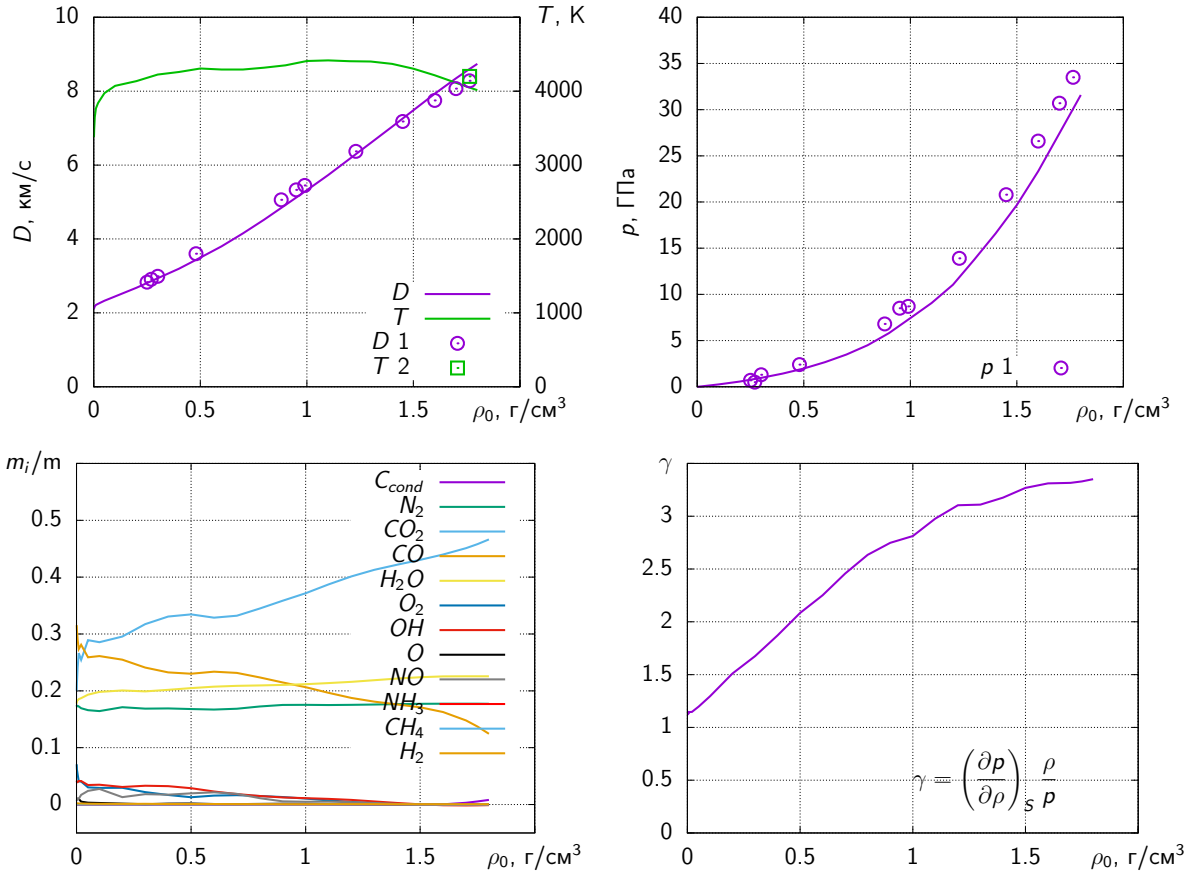


Рисунок B.5 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности. Сплошные линии – вычисления по модели, 1 – данные работы [163], 2 – [164].

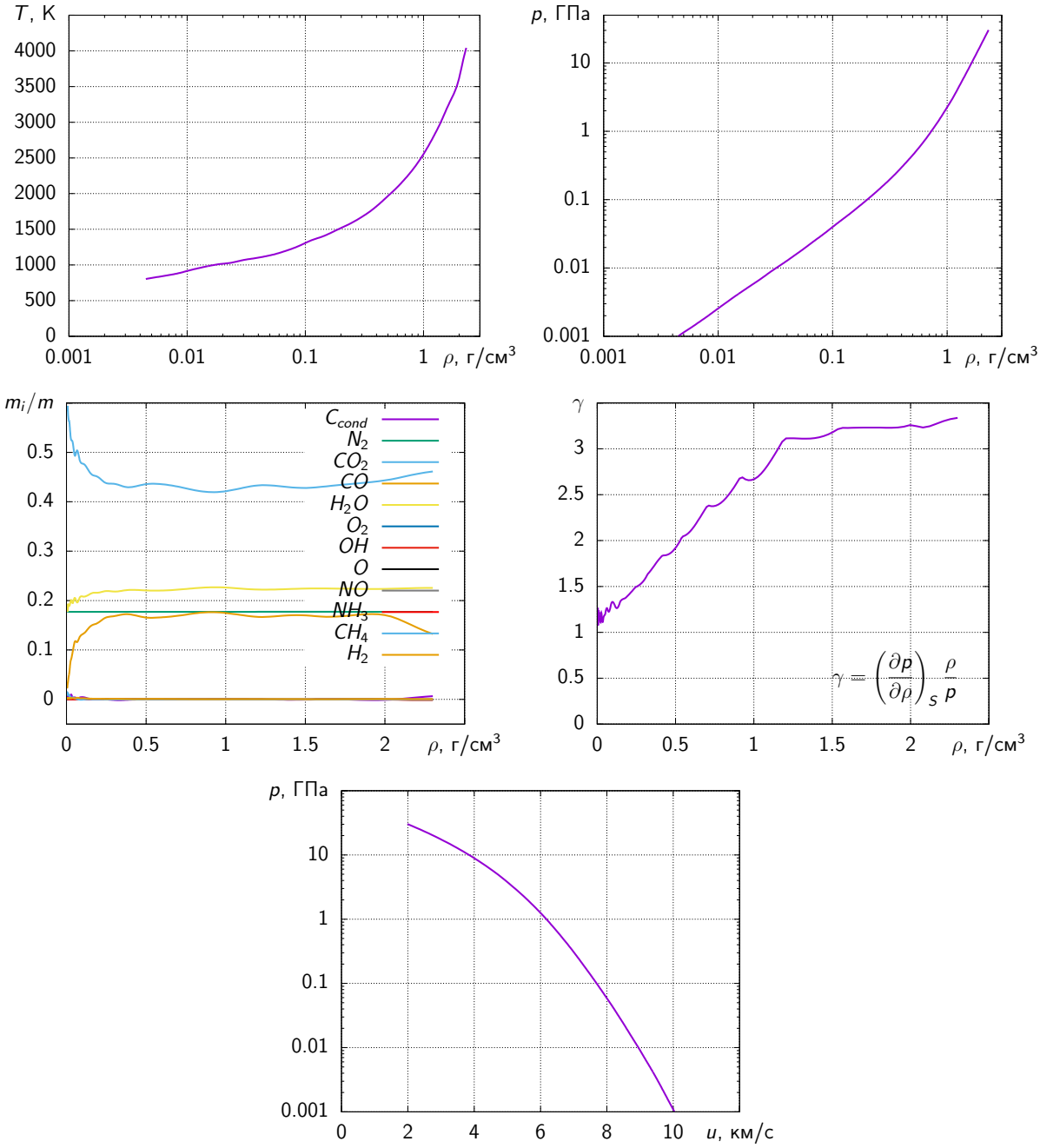


Рисунок В.6 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации заряда с начальной плотностью $\rho_0 = 1.77$ г/см^3.

B.4 Гексоген

Гексоген ($C_3H_6N_6O_6$, $\Delta_f H^\circ_{cond} = 0.277$ МДж/кг).

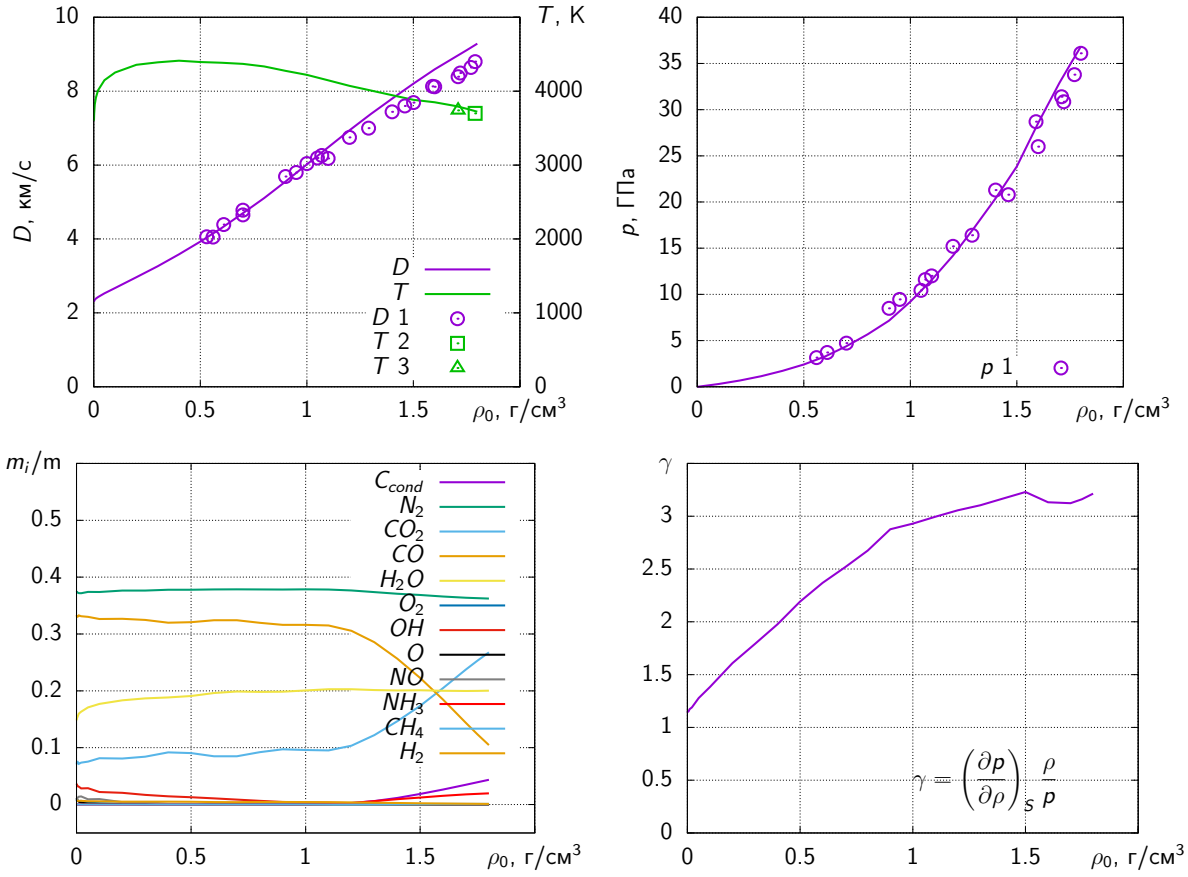


Рисунок B.7 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности. Сплошные линии – вычисления по модели, 1 – данные работы [99], 2 – [164], 3 – [167].

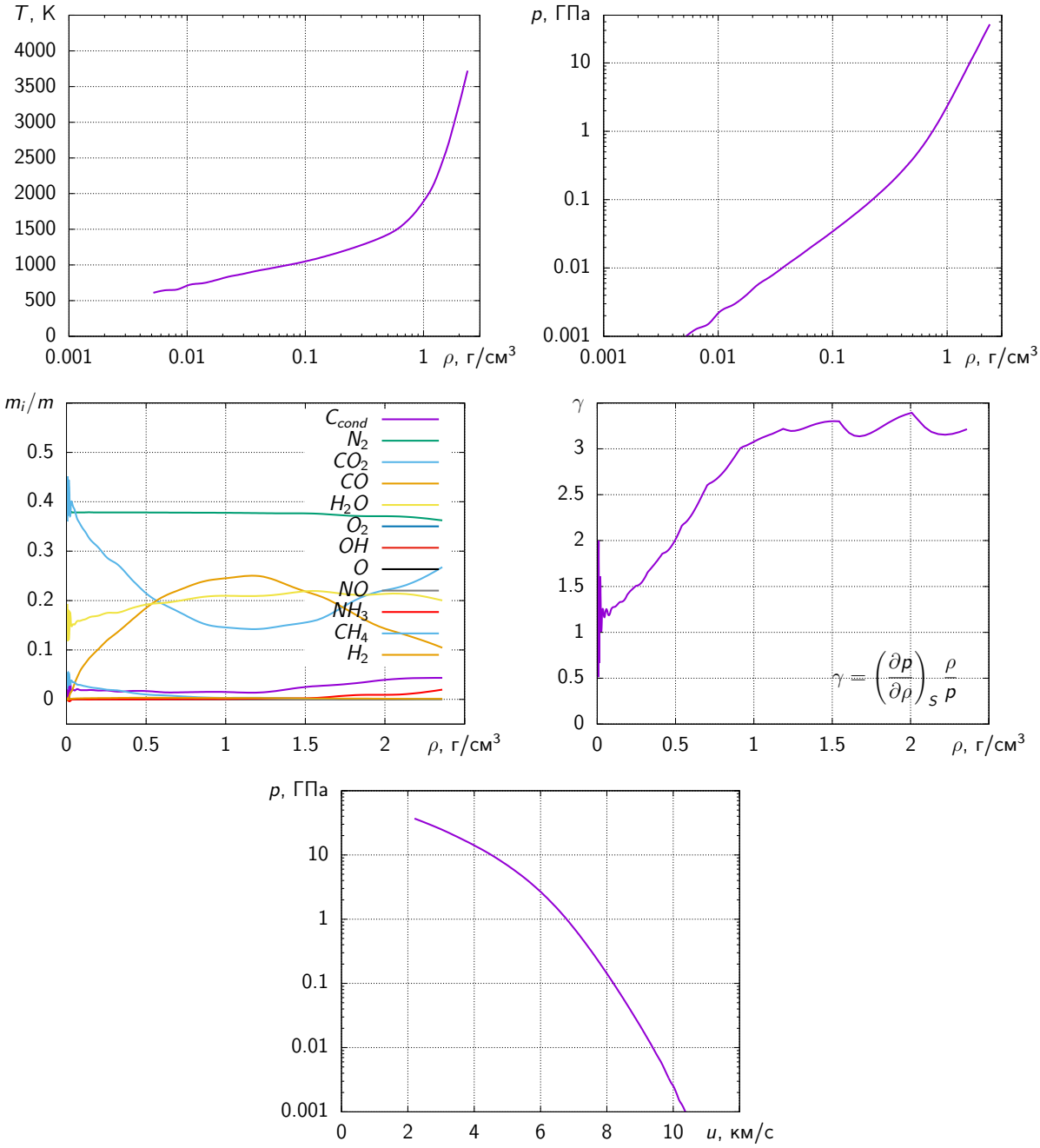


Рисунок В.8 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации заряда с начальной плотностью $\rho_0 = 1.80$ г/см^3.

B.5 Октоген

Октоген ($C_4H_8N_8O_8$, $\Delta_f H^\circ_{cond} = 0.253$ МДж/кг).

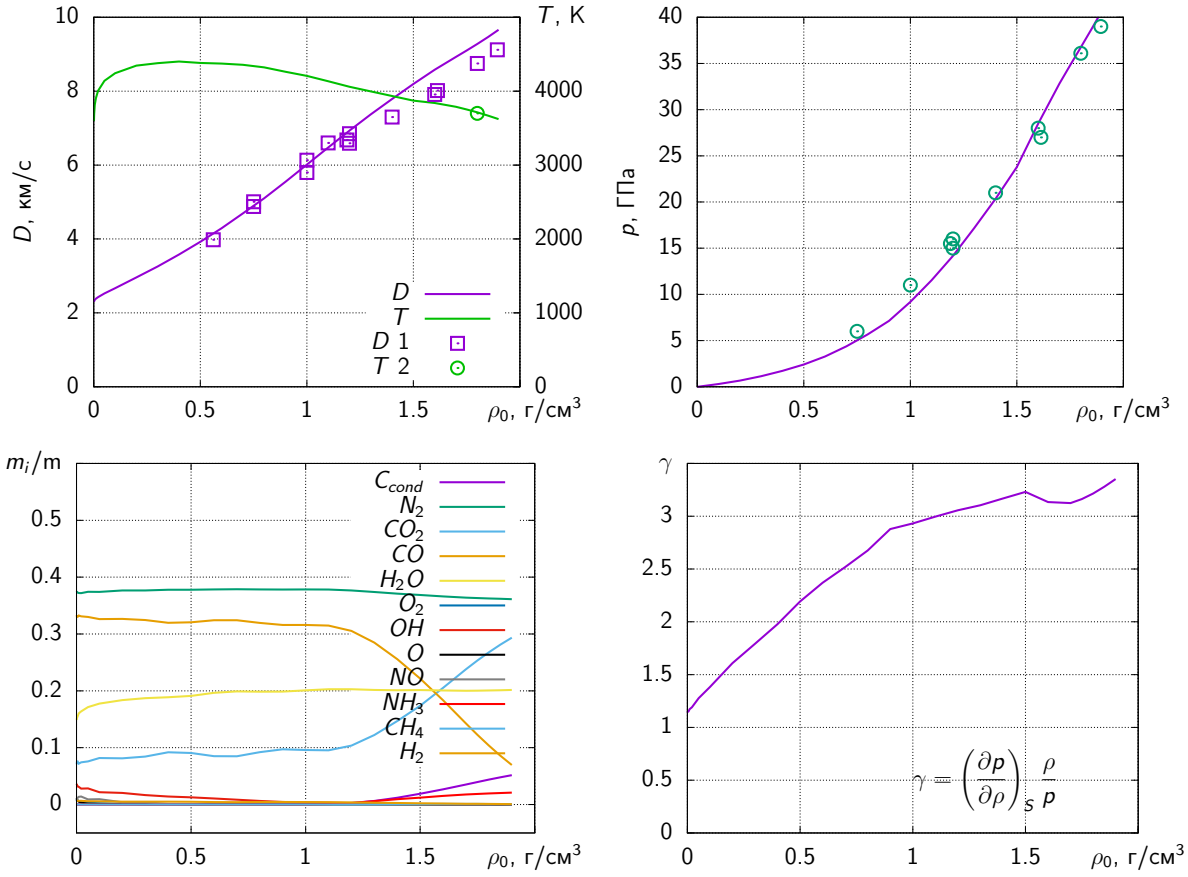


Рисунок B.9 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности. Сплошные линии – вычисления по модели, 1 – данные работы [99], 2 – [167].

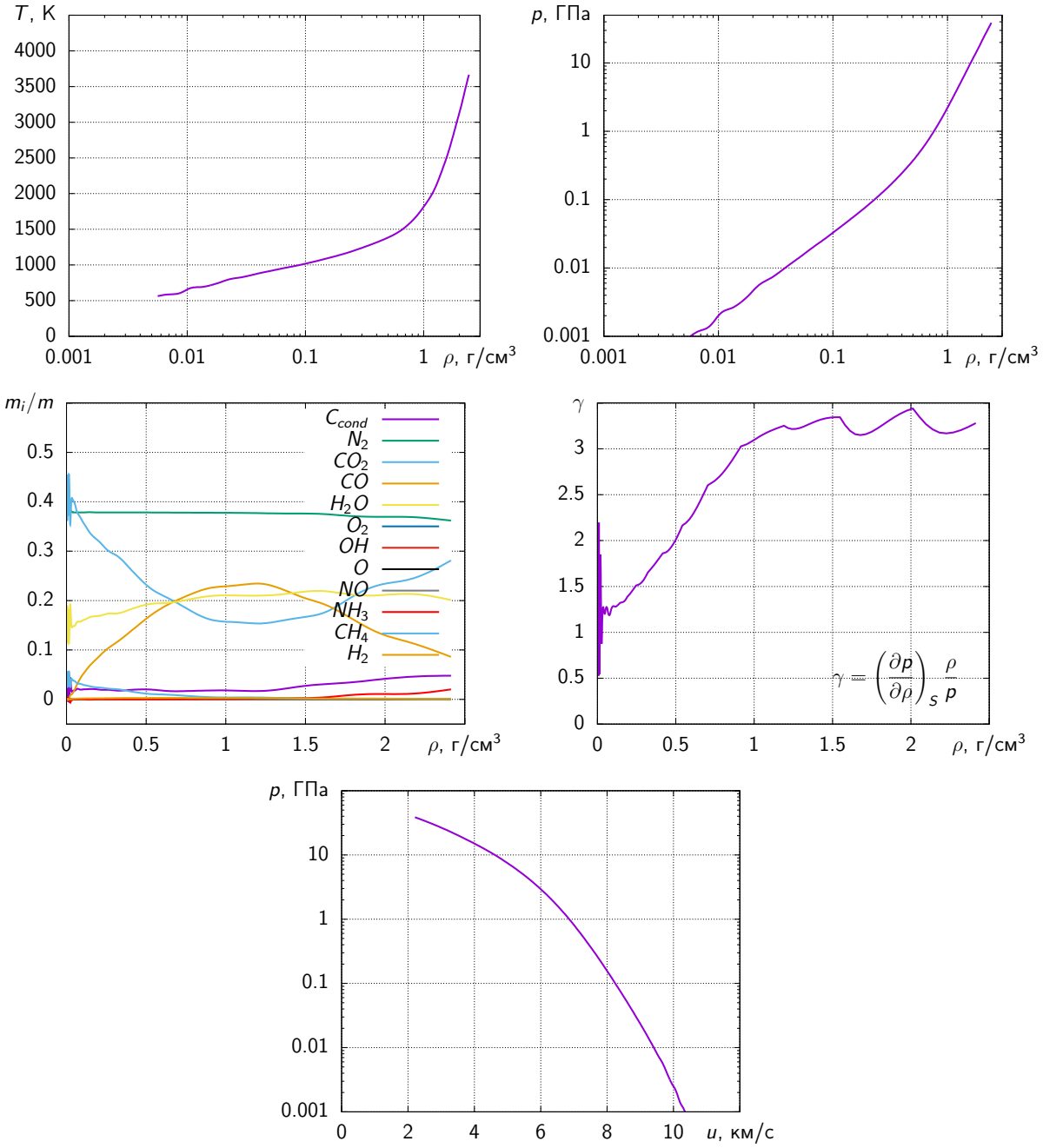


Рисунок В.10 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации заряда с начальной плотностью $\rho_0 = 1.85$ г/см^3.

B.6 Тротил

Тротил ($C_7H_5N_3O_6$, $\Delta_f H^\circ_{cond} = -0.328$ МДж/кг). Экспериментальные работы по исследованию детонационных свойств тротила [98, 99, 167].

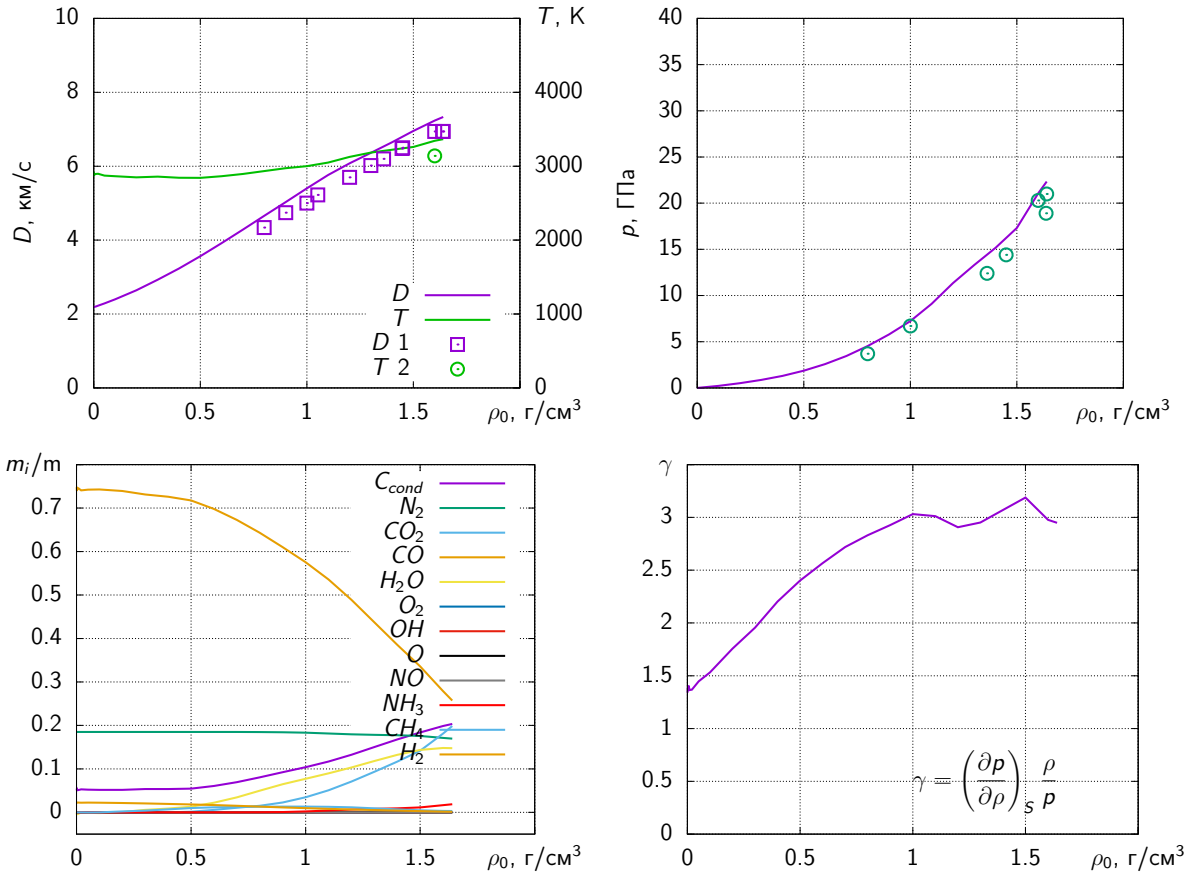


Рисунок B.11 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности. Сплошные линии – вычисления по модели, 1 – данные работы [99], 2 – [167].

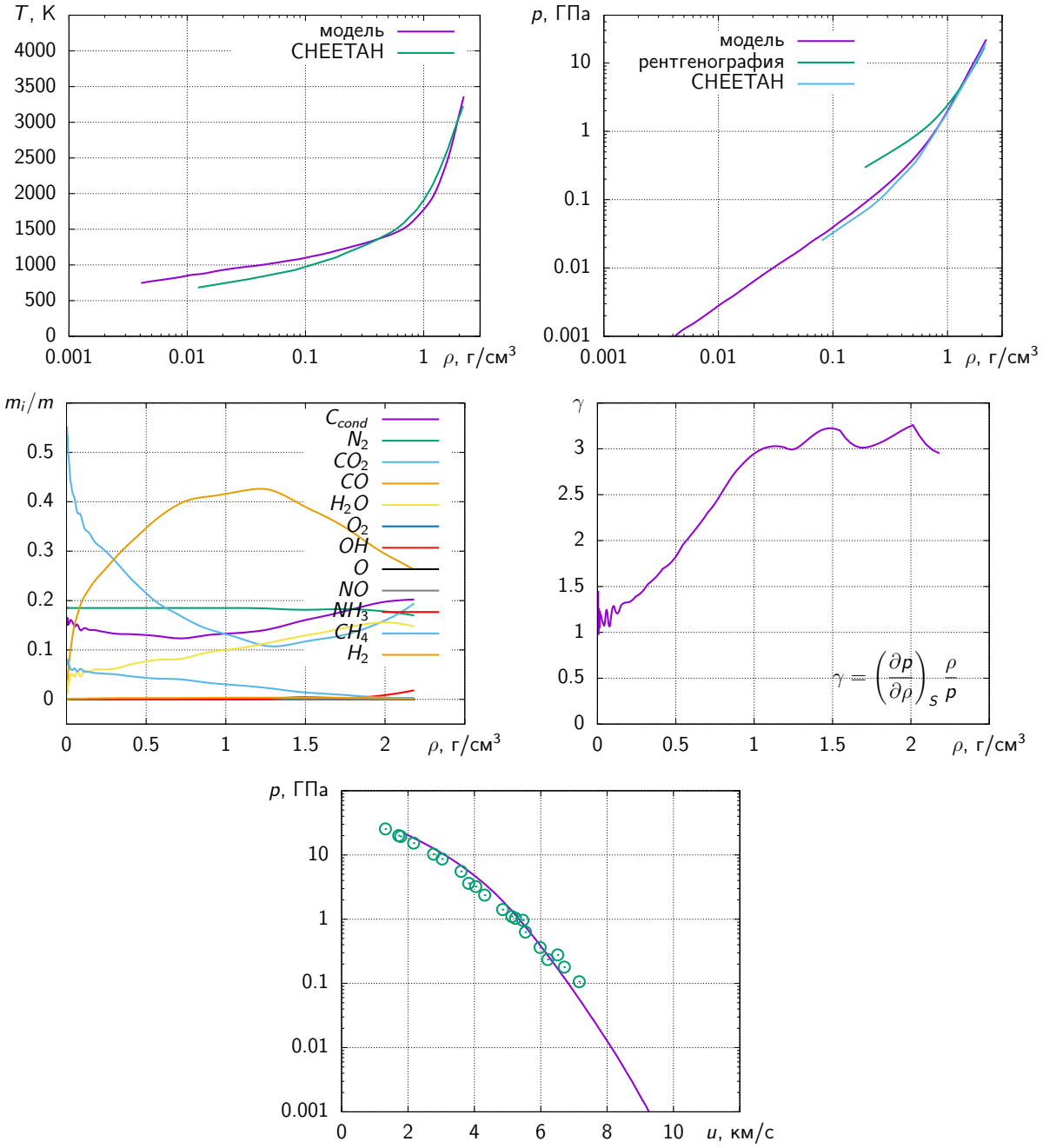


Рисунок В.12 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации заряда с начальной плотностью $\rho_0 = 1.63$ г/см^3. CHEETAH – [168], символы – данные работы [98].

B.7 Тротил + гексоген

Тротил 50 % + гексоген 50 % ($\Delta_f H^\circ_{cond} = -0.025$ МДж/кг).

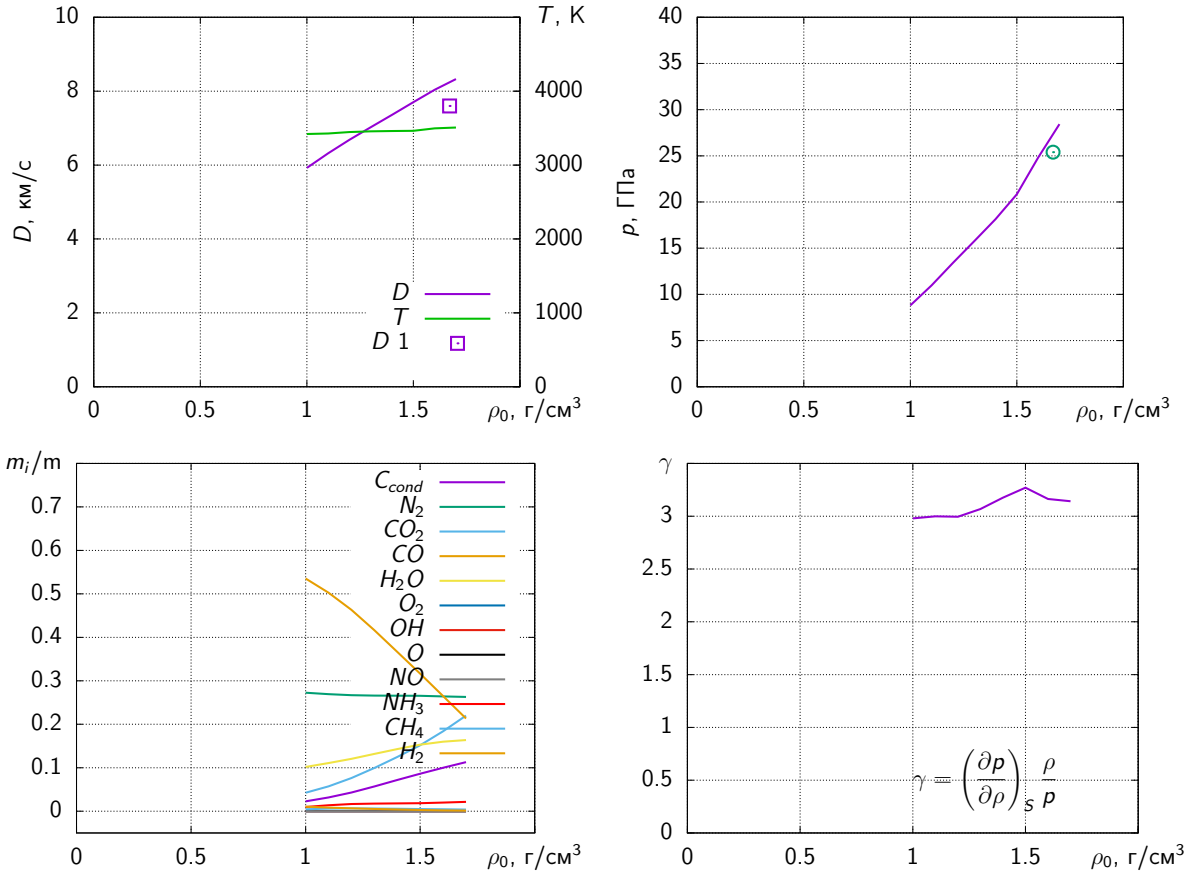


Рисунок B.13 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности. Сплошные линии – вычисления по модели, 1 – данные работы [99], 2 – [167].

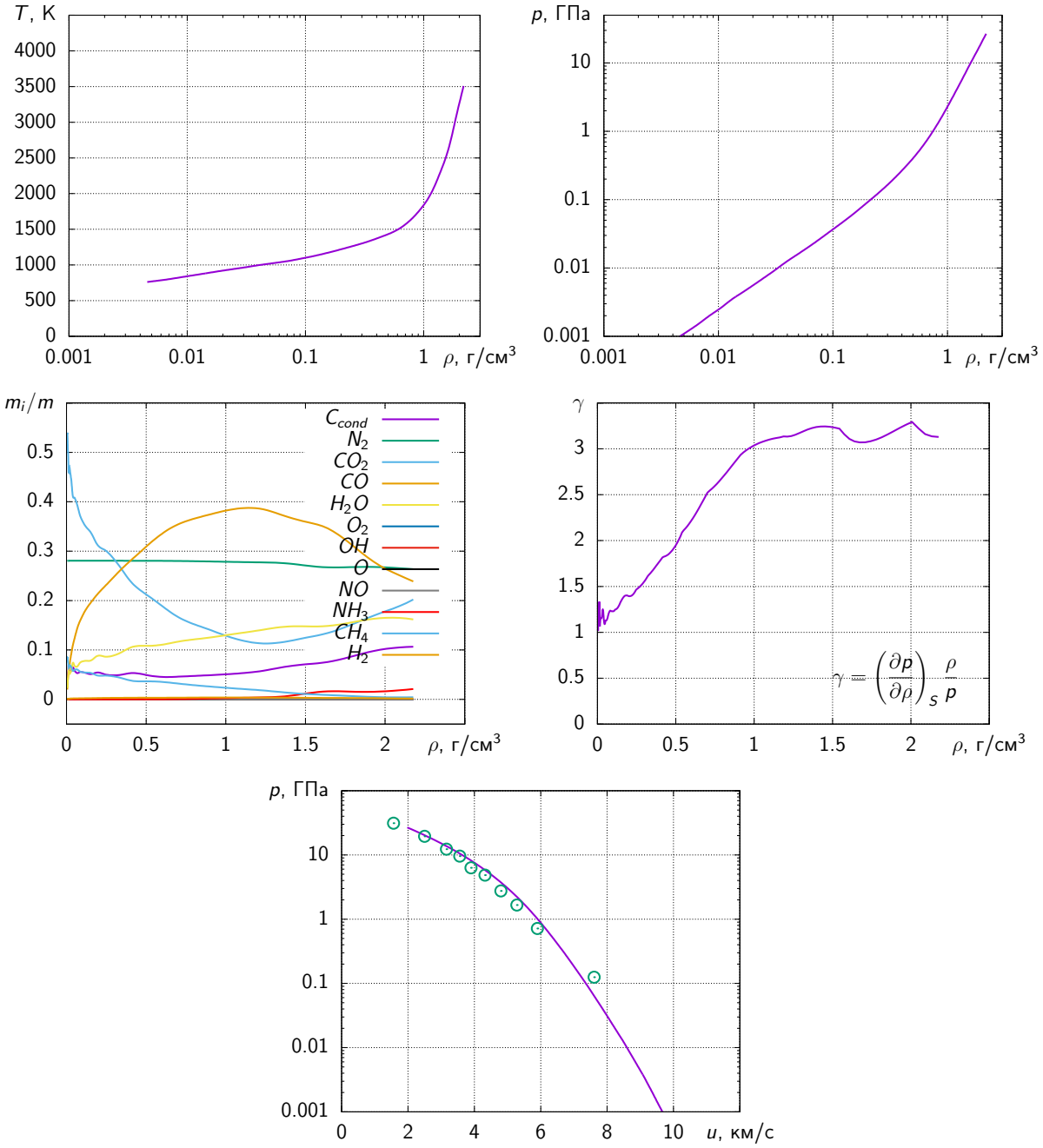


Рисунок В.14 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации заряда с начальной плотностью $\rho_0 = 1.65$ г/см^3. Символы – данные работы [98].

B.8 Татб

Татб ($C_6H_6N_6O_6$, $\Delta_f H^\circ_{cond} = -0.570$ МДж/кг).

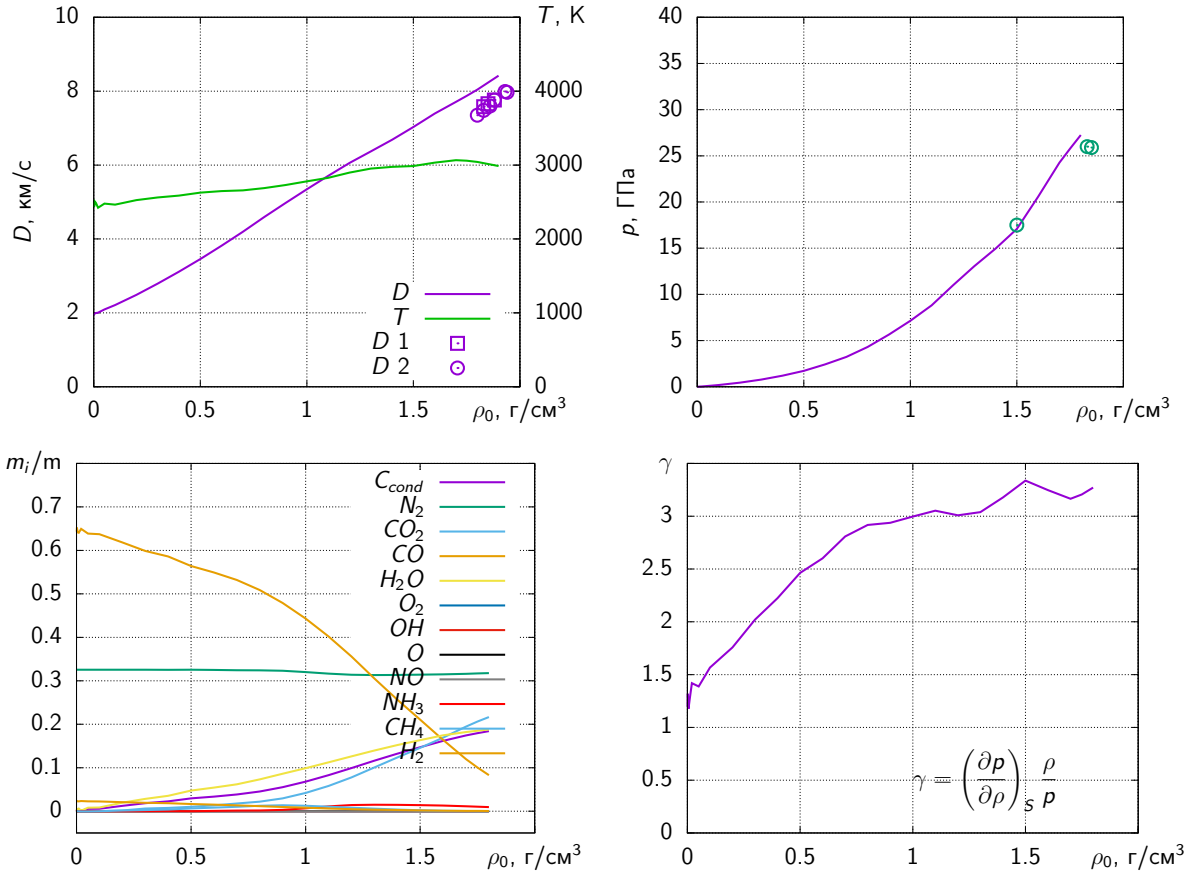


Рисунок B.15 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности. Сплошные линии – вычисления по модели, символы – данные работы [99].

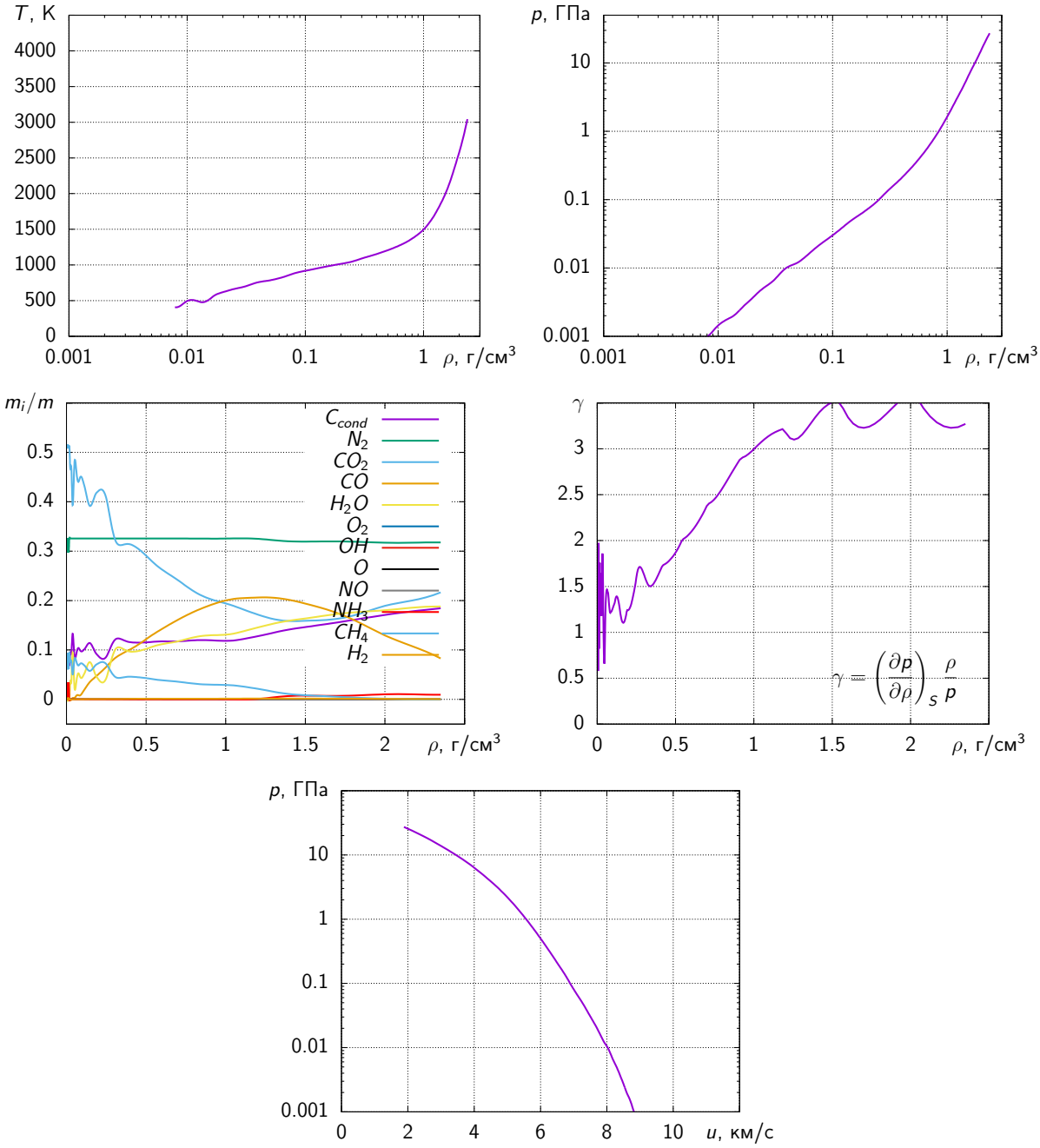


Рисунок В.16 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации заряда с начальной плотностью $\rho_0 = 1.80$ г/см^3.

B.9 ГНС

Гексанитростильбен ($C_{14}H_6N_6O_{12}$, $\Delta_f H^\circ_{cond} = 0.151$ МДж/кг).

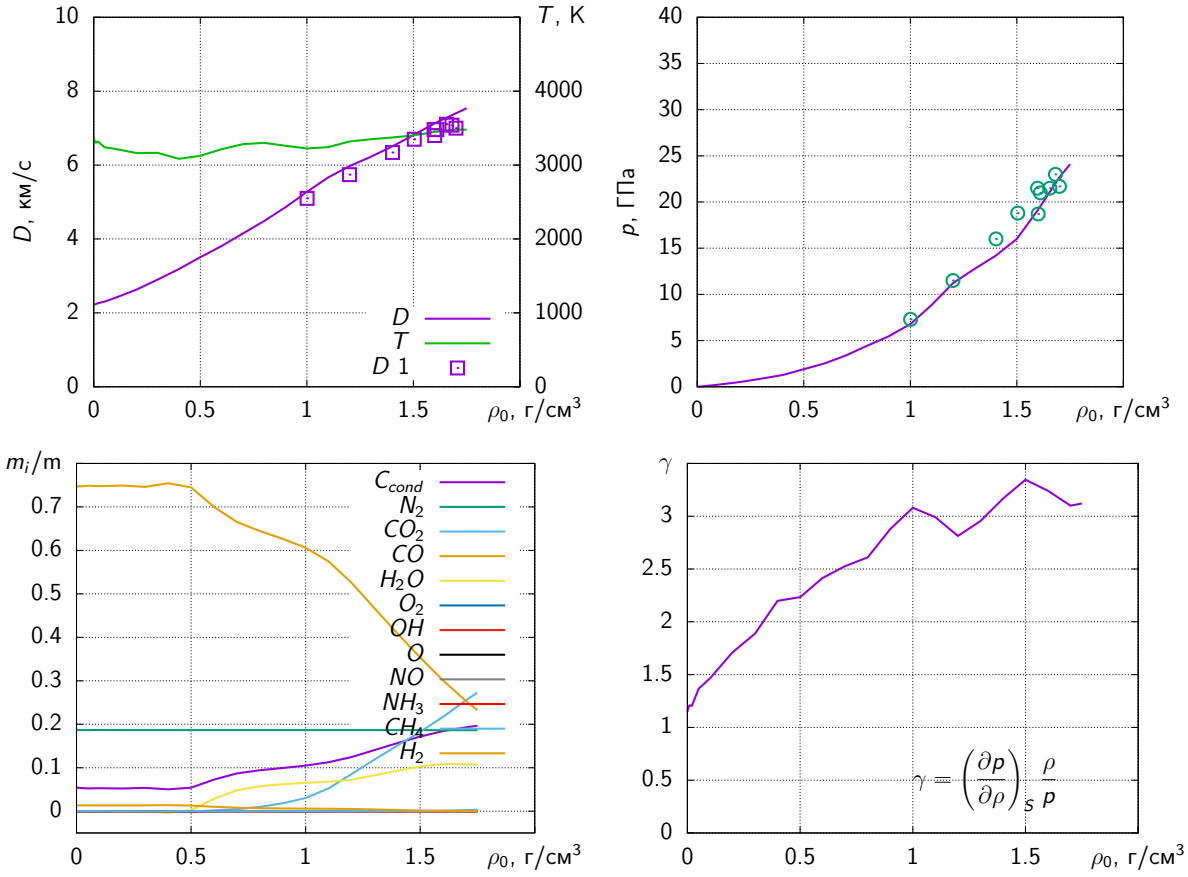


Рисунок B.17 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности. Сплошные линии – вычисления по модели, символы – данные работы [99].

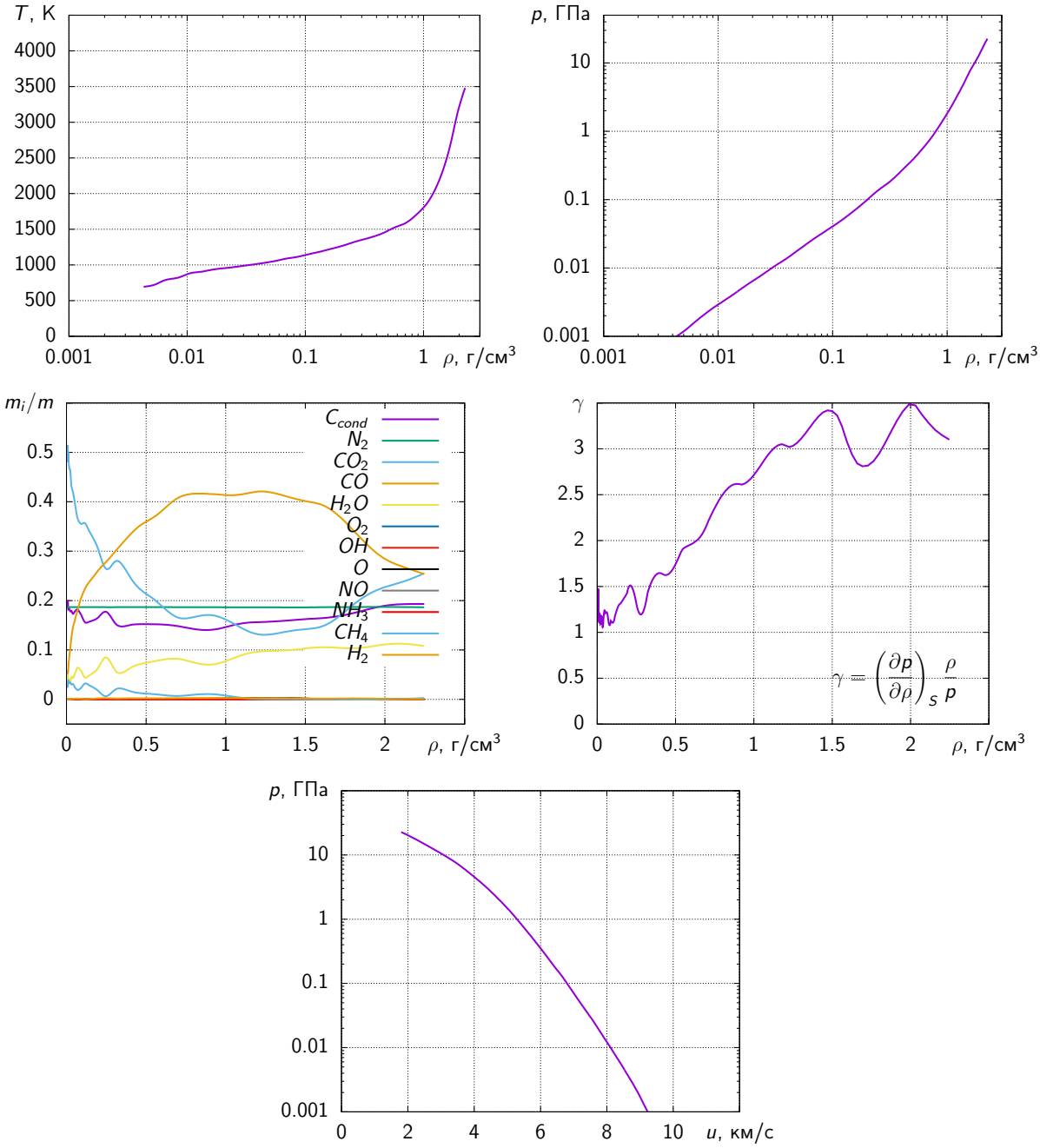


Рисунок В.18 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации заряда с начальной плотностью $\rho_0 = 1.70$ г/см^3.

B.10 ГАВ

ГАВ ($C_6H_6N_{12}O_{12}$, $\Delta_f H^\circ_{cond} = 0.861$ МДж/кг).

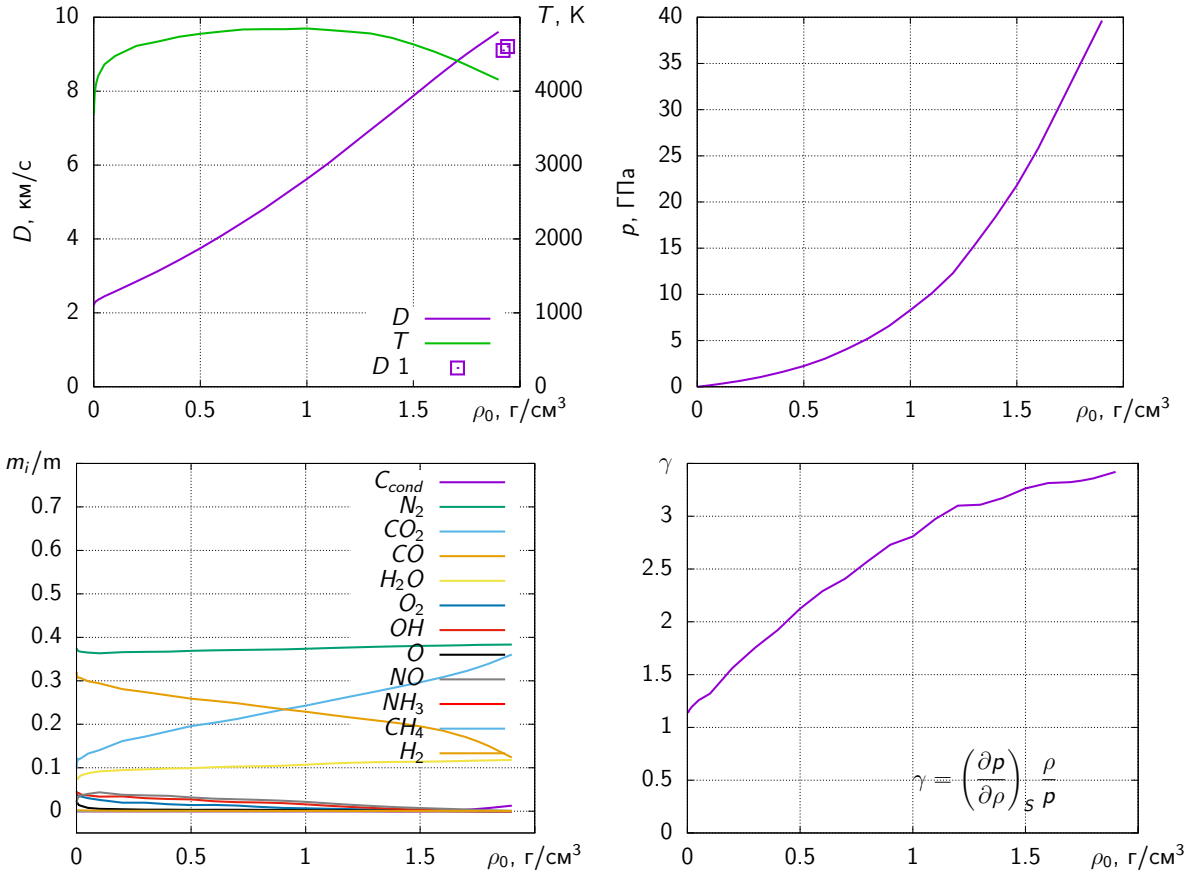


Рисунок B.19 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности. Сплошные линии – вычисления по модели, символы – данные работы [99].

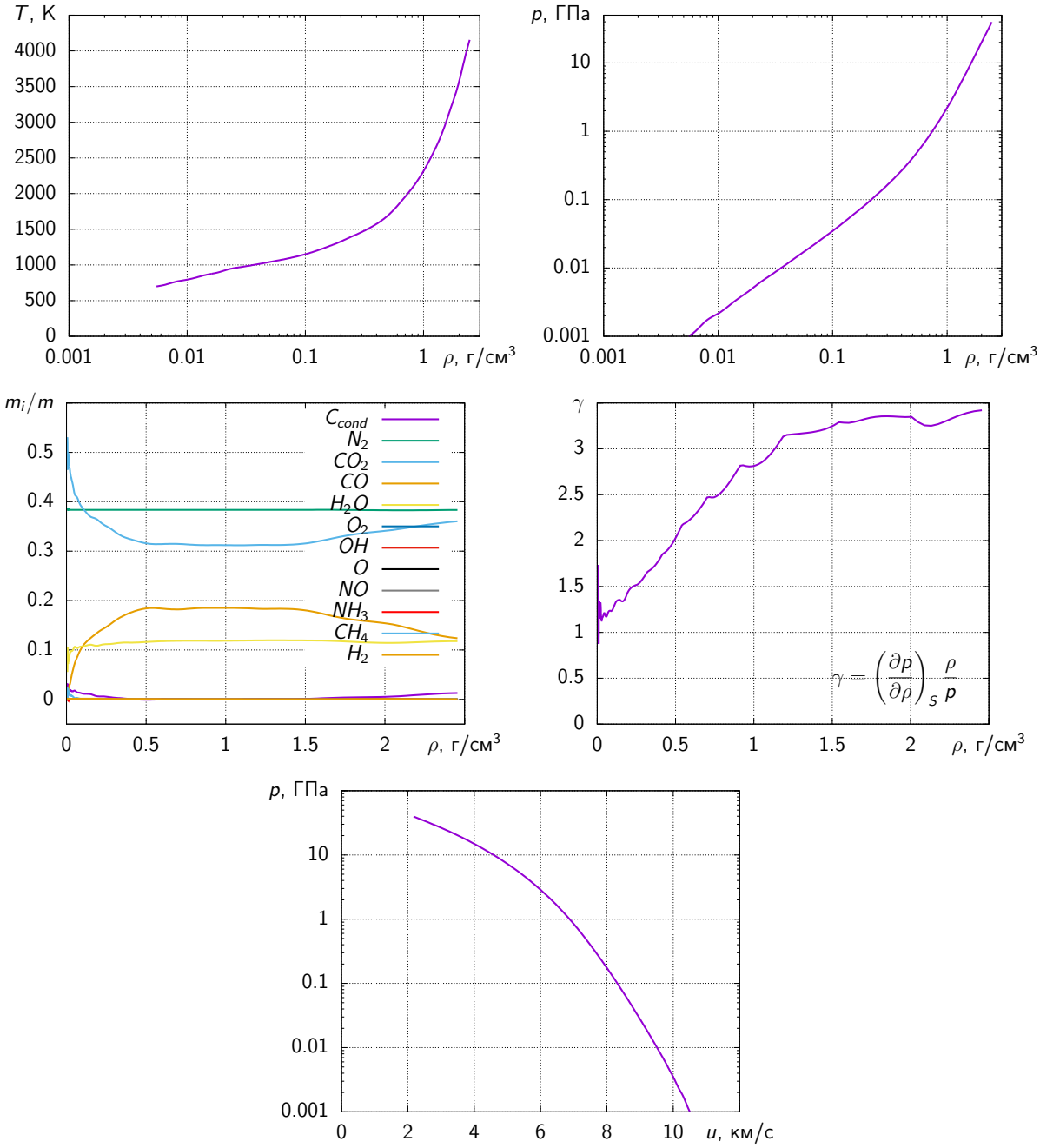


Рисунок В.20 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации заряда с начальной плотностью $\rho_0 = 1.90$ г/см^3.

B.11 БТФ

БТФ ($C_6N_6O_6$, $\Delta_f H^\circ_{cond} = 2.304$ МДж/кг). Экспериментальные работы по исследованию детонационных свойств бтф [99, 172].

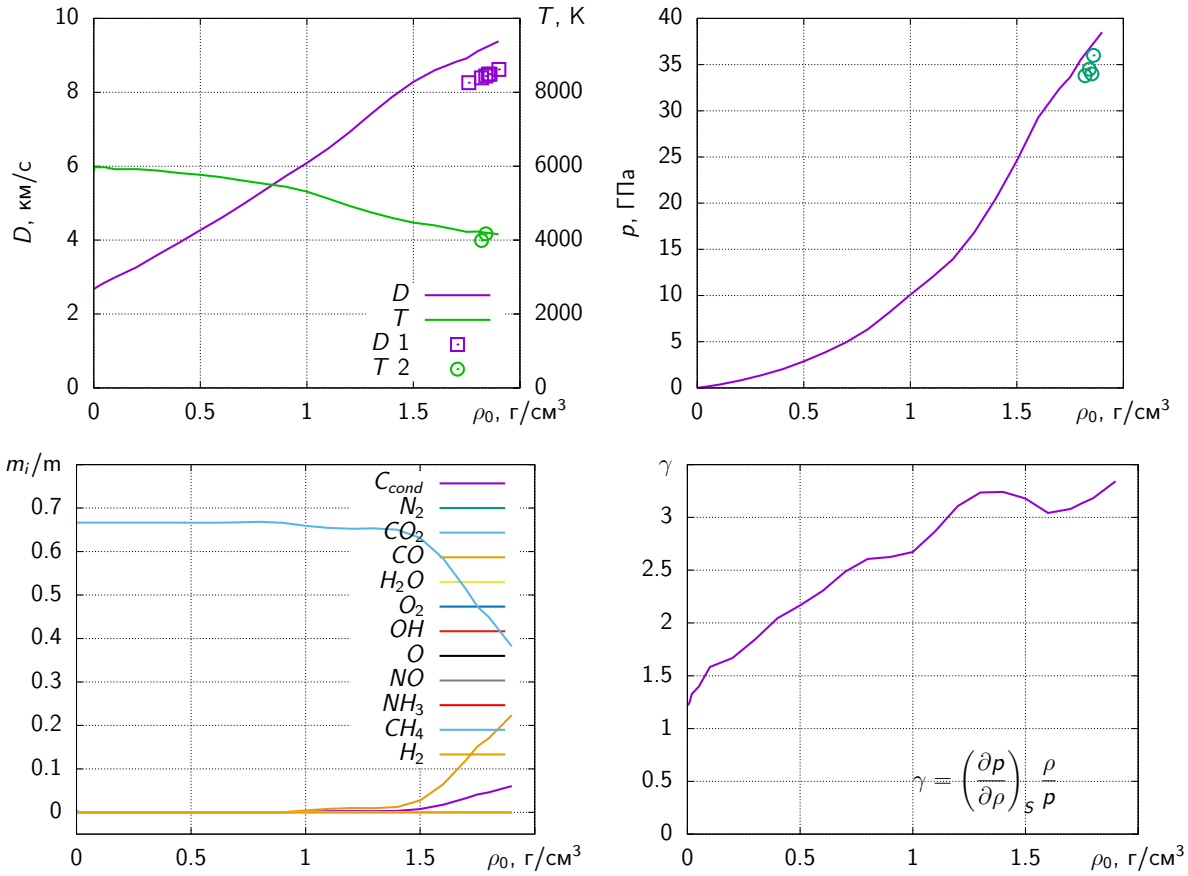


Рисунок B.21 – Зависимость параметров детонации Чепмена-Жуге от начальной плотности. Сплошные линии – вычисления по модели, 1 – данные работы [99], 2 – [172].

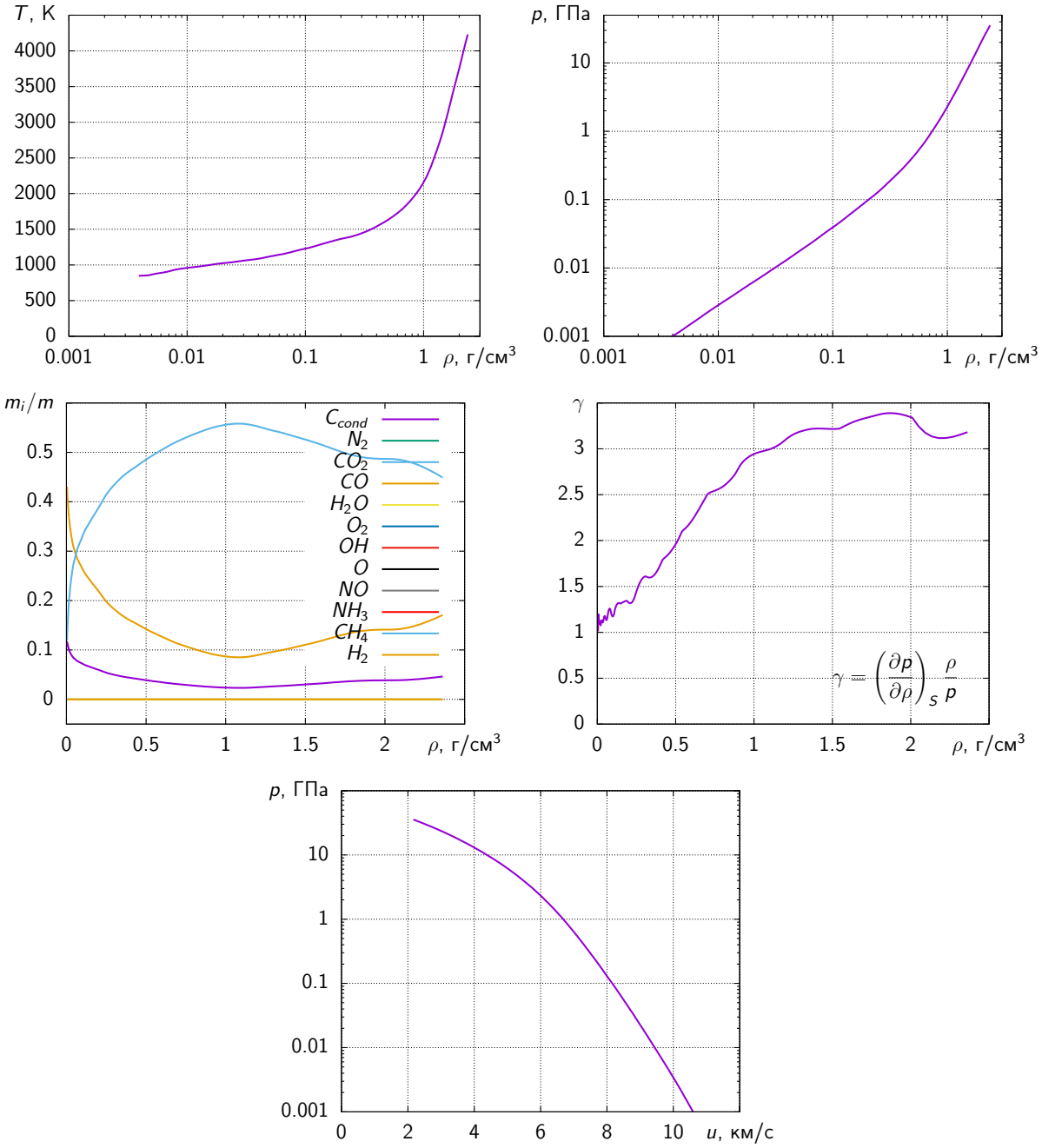


Рисунок В.22 – Адиабаты разгрузки продуктов детонации заряда с начальной плотностью $\rho_0 = 1.80$ г/см^3.

Приложение Г

Вклад Э.Р. Прууэла в совместные публикации

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.

1. 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. — DOI: 10.1016/j.nima.2007.01.039. — URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900207000800.

2. 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. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2007/2007_ces_02_ru.pdf.

3. 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. — DOI: 10.1016/j.nima.2008.12.192. — URL: http://www.sciencedirect.com/

science/article/pii/S0168900208021050.

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. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2010/12620-pruuel.pdf.

5. 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. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2011/2011_fgv.pdf.

6. 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. — DOI: 10.7868/S086956521301012X. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2013/dan_DOK0038.pdf.

7. 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. — DOI:10.7868/S036767651302035X. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2013/IFI0254.pdf.

8. 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. — URL: http://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2013/Ten_2013_1.pdf.

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.

10. 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. — DOI: 10.1088/1742-6596/754/5/052001.

11. 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. — DOI: 10.1088/1742-6596/899/4/042004.

12. 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.

13. Прууэл Э. Р., Васильев А. А. Уравнение состояния продуктов газо-

вой детонации. Учет формирования конденсированной фазы углерода // Физика горения и взрыва. — 2021. — Т. 57, № 5. — С. 74–85. — DOI:10.15372/FGV20210507.

14. 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. — DOI: 10.15372/FGV20210311.

В работах [1, 2, 5] Э.Р. Прууэлом был предложен способ восстановления плотности течения использующий данные измерений в разные моменты времени, была показана его хорошая устойчивость к экспериментальной ошибке, были проведены сравнения восстановленных экспериментальных распределений плотности с численным расчетом.

В работах [3, 4] Э.Р. Прууэлом был предложен способ последовательного восстановления газодинамических параметров детонационного течения: плотности, вектора массовой скорости и давления; были сформулированы ограничения метода, связанные с требованием потенциальности течения.

В работах [6, 7, 9, 10, 13] Э.Р. Прууэлом был предложен способ восстановления газодинамических параметров детонационного течения и баротропного уравнения состояния продуктов взрыва; использование законов сохранения газовой динамики позволило значительно увеличить устойчивость метода и снизить ошибку восстановления параметров исследуемого течения.

В работе [8] Э.Р. Прууэлом была предложена методика обработки экспериментальных данных и построения ударной адиабаты. Это позволило получить численные значения параметров адиабаты.

В работе [11] Э.Р. Прууэлом была предложена методика определения параметров инициирующего газового потока. Это позволили по измеренной в эксперименте скорости ударной волны определить параметры воздействия на исследуемый заряд.

В работе [12] Э.Р. Прууэлом была предложена методика обработки рентгенографических данных, позволившая довести временное разрешение до 124 нс.

В работе [14] Э.Р. Прууэлом была реализована численная модель уравнения состояния реагирующих газов и было проведено сравнение с экспериментальными данными по зависимостям скоростей детонации от состава горючей смеси.

Согласие основных соавторов перечисленных работ на использование полученных совместных результатов в диссертационной работе.

Васильев Анатолий Александрович

Кашкаров Алексей Олегович

Просвирнин Кирилл Михайлович

Рубцов Иван Андреевич

Смирнов Евгений Борисович

Тен Константин Алексеевич

Толочко Борис Петрович

Шехтман Лев Исаевич