

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗМОЖНЫХ МЕХАНИЗМОВ ОБРАЗОВАНИЯ ГОРЯЧИХ ТОЧЕК

Ф.Г. Магазов¹, Е.С. Шестаковская¹

¹Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

Данная работа посвящена изучению последствий выхода инициирующей ударной волны, распространяющейся по конденсированному веществу, на свободную поверхность. Для замыкания законов сохранения массы, импульса и внутренней энергии было построено уравнение состояния конденсированного вещества. Вид данного уравнения состояния соответствовал форме уравнения состояния Ми – Грюнайзена с разделением давления и внутренней энергии на тепловую и холодную части. Отношение тепловой части давления к тепловой части внутренней энергии определялся коэффициентом Грюнайзена, который в данной работе являлся постоянной величиной. Холодная часть давления описывалась потенциалом в форме Тета. Анализ результатов, представленных в работе, показывает, что после выхода ударной волны на свободную поверхность в конденсированное вещество начинает распространяться интенсивная волна разрежения, которая приводит к тому, что в конденсированном веществе падает давление и сильно возрастает напряжение, которое может привести к нарушению сплошности материала и появлению отдельной микрочастицы. Тем самым было подтверждено предположение о возможности появления горячих точек в результате прогрева и сгорания мельчайших капелек конденсированного взрывчатого вещества за время схлопывания пузырька газа.

Ключевые слова: математическая модель; уравнение состояния; сплошность; горячая точка; ударная волна.

Введение

Известно, что для замыкания математических моделей многокомпонентных гетерогенных сред [1–5] необходимо определить выражения для интенсивности обмена массой, импульсом и энергией между компонентами и фазами смеси. Данные соотношения могут быть получены только в результате детального рассмотрения механизма взаимодействия между компонентами и фазами. Данная работа посвящена математическому моделированию возможных механизмов образования горячих точек при инициировании быстропротекающих процессов в гетерогенных взрывчатых веществах (ВВ).

В настоящее время принято считать, что под действием инициирующей ударной волны на разрывах сплошности внутри гетерогенного ВВ возникают горячие точки, протекание реакции в которых способствует усилению ударной волны. Это приводит к тому, что в гетерогенных ВВ детонация возбуждается легче, чем в гомогенных [6, 7].

В соответствии с принятыми в настоящее время представлениями процесс инициирования детонации в гетерогенных ВВ проходит следующие стадии [7]:

- инициирование реакций в некоторой области ВВ (горячей точке);
- ускорение реакций горения и переход в детонацию с малой скоростью;
- переход детонации с малой скоростью в режим нормальной детонации.

В общем случае теория очагового инициирования ВВ (образования горячих точек) должна ответить на два независимых вопроса [8]:

1) каковы причины появления очага разогрева при механическом воздействии на ВВ;

2) какими критическими параметрами (температура, размер, длительность существования) следует характеризовать горячую точку, которая приводит к взрыву ВВ.

При ответе на первый вопрос К. Юханссон и П. Персон [9] показали, что если в сжатом газовом включении появляются мельчайшие капельки или насыщенные пары ВВ, то их воспламенение может явиться причиной взрыва, поскольку микрочастицы способны прогреться за время схлопывания пузырька газа.

Для подтверждения этого предположения в настоящей работе была решена задача о выходе ударной волны на свободную поверхность и проведен анализ возможности нарушения сплошности конденсированного ВВ вблизи данной поверхности.

1. О нарушении сплошности

Покажем, что при распространении ударной волны (УВ) в пузырьковой жидкости, в областях около поверхности пузырька может наблюдаться нарушение сплошности в жидкой фазе. Это связано с большим градиентом давления на границе «жидкость-газ», что приводит к увеличению скорости жидкой фазы в приповерхностном слое, и как следствие отрыв и образование отдельных капель ВВ около поверхности.

Для оценки данного явления рассмотрим задачу, моделирующую выход УВ на свободную поверхность (рис. 1) со следующими начальными условиями:

$$P_{10} = 4,66 \cdot 10^9 \text{ Па}, \rho_{10} = 1662,1 \text{ кг/м}^3, u_{10} = 944 \text{ м/с},$$

$$P_{20} = 1,045 \cdot 10^5 \text{ Па}, \rho_{20} = 1,2249 \text{ кг/м}^3, u_{20} = 0 \text{ м/с},$$

индексом «1» обозначены величины относящиеся к жидкой фазе, индексом «2» – к газовой.

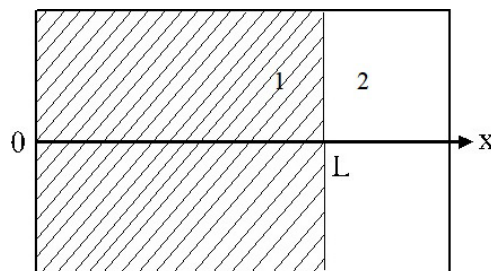


Рис. 1. Схема расчетной области

Для описания движения сплошной среды запишем законы сохранения массы, импульса и энергии для плоского одномерного случая в лагранжевых координатах:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_1}{\partial t} - V_{10} \frac{\partial u_1}{\partial m} &= 0, & \frac{\partial u_1}{\partial t} + V_{10} \frac{\partial \Pi}{\partial m} &= 0, \\ \frac{\partial E_1}{\partial t} + \frac{\partial V_1}{\partial m} &= 0, & P_1 &= P_1(V_1, E_1), \end{aligned} \quad (1)$$

где V_1, u_1, E_1, P_1, m – удельный объем, скорость, удельная внутренняя энергия, давление и лагранжева массовая координата соответственно, $P_1 = P_1(V_1, E_1)$ – уравнение состояния жидкого ВВ, $\Pi = P_1 - \sigma$, $\sigma = 2\mu \frac{\partial u_1}{\partial m}$, σ – тензор напряжений.

Конкретный вид уравнения состояния определяется либо из опыта, либо находится, в некоторых частных случаях, методами статистической физики. Для конденсированных веществ в настоящее время наиболее широко разработаны полуэмпирические методы построения уравнений состояния [10–13], основанные на представлении давления и внутренней энергии в виде суммы упругих (холодных) и тепловых составляющих

$$\begin{cases} P_1 = P_{1X}(V_1) + P_{1T}(V_1, T_1), \\ E_1 = E_{1X}(V_1) + 3NkT_1, \end{cases} \quad (2)$$

где N – число атомов в грамме, k – постоянная Больцмана, T_1 – температура ВВ.

Тепловые составляющие давления и внутренней энергии конденсированного вещества связаны между собой следующим образом:

$$\begin{cases} P_{1T} = \Gamma(V_1) \frac{C_V T_1}{V_1} = \Gamma(V_1) \frac{E_{1T}}{V_1}, \\ E_{1T} = C_V T_1, \end{cases} \quad (3)$$

где Γ – коэффициент Грюнайзена, характеризующий отношение давления к тепловой энергии решетки.

Для аналитического описания кривой холодного сжатия $P_{1X}(V_1)$ часто пользуются интерполяционными формулами различного типа. В данной работе была использована широко распространенная формула Тета [6]

$$P_{1X} = B_1 \left[\left(\frac{V_{10}}{V_1} \right)^n - 1 \right].$$

Внутренняя энергия холодного сжатия тогда определяется уравнением

$$E_{1X} = - \int_{V_{10}}^{V_1} P_{1X} dV_1 = B_1 V_{10} \left\{ \frac{1}{n-1} \left[\left(\frac{V_{10}}{V_1} \right)^{n-1} - 1 \right] - 1 + \frac{V_1}{V_{10}} \right\}.$$

Используя соотношения (2) и (3), получим уравнение состояния в форме Ми – Грюнайзена

$$\begin{aligned} E_1 = E_{1X} + \frac{V_1}{\Gamma_1} (P - P_X) = B_1 V_0 \left\{ \frac{1}{n-1} \left[\left(\frac{V_0}{V_1} \right)^{n-1} - 1 \right] - 1 + \frac{V_1}{V_0} \right\} - \\ - \frac{B_1 V_1}{\Gamma_1} \left[\left(\frac{V_0}{V_1} \right)^n - 1 \right] + \frac{P V_1}{\Gamma_1}. \end{aligned}$$

Неизвестные B_1, n определяются из условия совпадения теоретической ударной адиабаты конденсированного вещества с экспериментальной адиабатой [14].

Для численного решения системы (1) использован метод Неймана – Рихтмайера [15], в котором использовалась искусственная диссипация (вязкость) из работы [16]. С учетом этого в исходной системе уравнений Π заменяется на $\bar{\Pi} = \Pi + q$, где величина q является искусственной вязкостью

$$q_m = -\delta \rho_{10} (u_{1\ m+1}^n - u_{1\ m}^n) (\sigma_1 a_0 + \sigma_2 |u_{1\ m+1}^n - u_{1\ m}^n|),$$

$$\delta = \begin{cases} 0, & u_{1\,m+1}^n - u_{1\,m}^n \geq 0, \\ 2, & u_{1\,m+1}^n - u_{1\,m}^n < 0. \end{cases}$$

На границе «жидкость-газ» используется условие в виде

$$u_1^{n+1} = u_1^n - \frac{dt}{0,5 \cdot h} \cdot (P_{20} - P_1^n).$$

Расчеты проводились для жидкого ВВ, близкого по характеристикам к глицерину с $\rho_{10} = 1261 \text{ кг/м}^3$, $B_1 = 0,18$, $n = 5,45$, $\Gamma_1 = 1,4$, $\mu = 1,48 \text{ Па} \cdot \text{с}$ в области $L = 1 \text{ мм}$. На рис. 2 (а – d) представлены зависимости давления, скорости, плотности и тензора напряжений от координаты на момент времени $t = 0,1 \text{ мкс}$.

Анализ результатов, представленных на рис. 2, показывает, что после выхода УВ на свободную поверхность в конденсированное вещество начинает распространяться интенсивная волна разрежения. Это приводит к тому, что в конденсированном веществе падает давление и сильно возрастает напряжение. В силу того, что всякое конденсированное вещество обладает пределом прочности, то в веществе вблизи свободной поверхности может появиться нарушение сплошности материала, которое приведет к появлению отдельной микрочастицы.

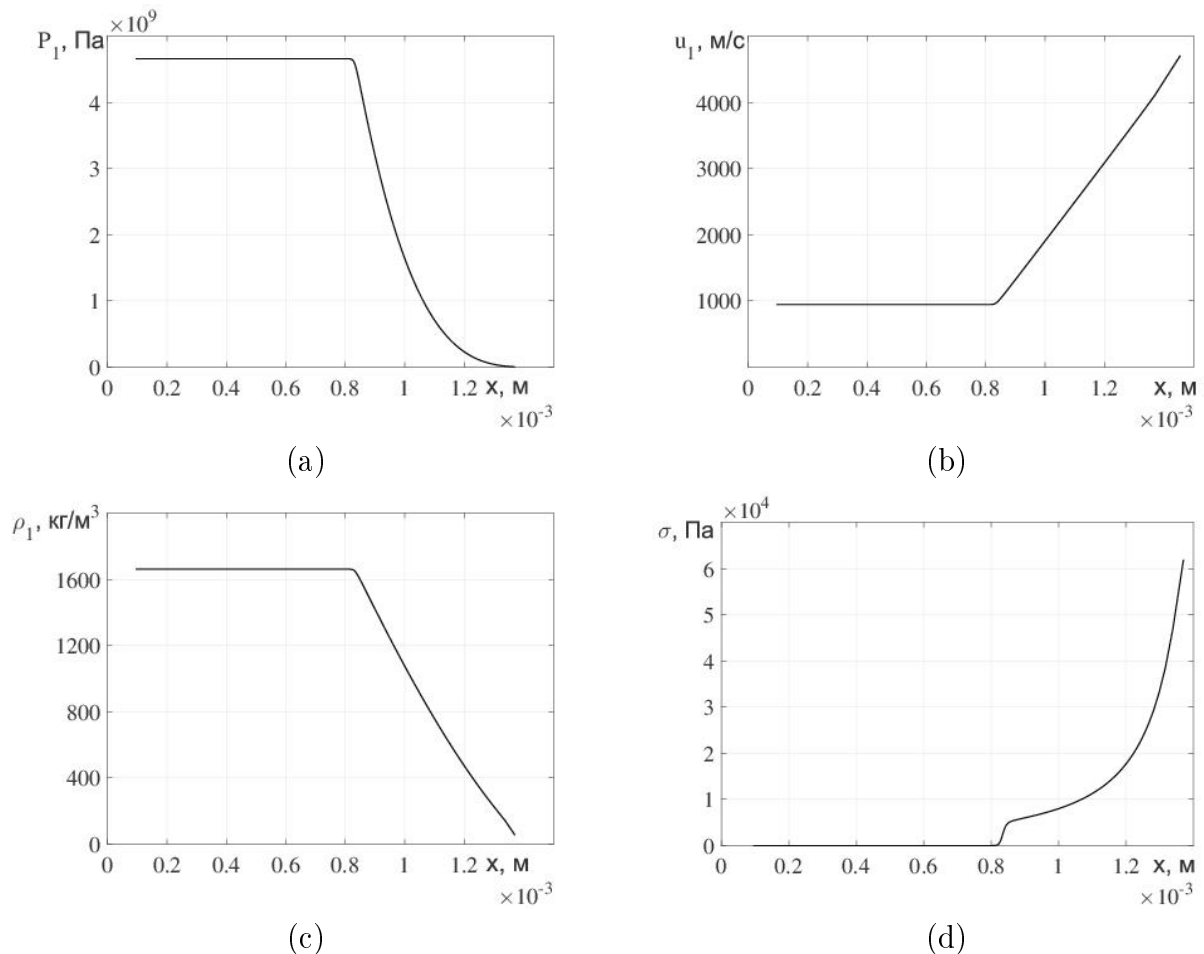


Рис. 2. Зависимости давления (а), скорости (б), плотности (с) и тензора напряжений (d) от координаты

Результаты, приведенные в работе, подтверждают предположение К. Юханссона и П. Персона [9] о возможности появления мельчайших капелек ВВ, способных прогореть и воспламениться за время схлопывания пузырька газа.

Статья выполнена при поддержке Правительства РФ (Постановление № 211 от 16.03.2013 г.), соглашение № 02.А03.21.0011.

Литература

1. Нигматулин, Р.И. Основы механики сплошных сред / Р.И. Нигматулин. – М.: Наука, 1978.
2. Крайко, А.Н. Механика многофазных сред / А.Н. Крайко, Р.И. Нигматулин, В.К. Старков, Л.Б. Стернин // Итоги науки и техники. Гидромеханика. – 1973. – Т. 6. – С. 93–174.
3. Яненко, Н.Н. Сверхзвуковые двухфазные течения в условиях скоростной неравновесности частиц / Н.Н. Яненко, Р.И. Солоухин, А.Н. Папырин, В.М. Фомин. – Новосибирск: Наука, 1980.
4. Ковалев, Ю.М. Анализ инвариантности некоторых математических моделей многокомпонентных сред / Ю.М. Ковалев, В.Ф. Куропатенко // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. – 2012. – № 6. – С. 4–7.
5. Ковалев, Ю.М. Математический анализ уравнений сохранения двухфазных смесей / Ю.М. Ковалев, Е.А. Ковалева // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2014. – Т. 7, № 2. – С. 29–37.
6. Орленко, Л.П. Физика взрыва и удара / Л.П. Орленко. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008.
7. Боуден, Ф. Возбуждение и развитие взрыва в твердых и жидких веществах / Ф. Боуден, А. Иоффе. – М.: Иностранная литература, 1955.
8. Дубовик, А.В. Чувствительность жидких взрывчатых систем к удару / А.В. Дубовик, В.К. Боболев. – М.: Наука, 1978.
9. Юханссон, К. Детонация взрывчатых веществ / К. Юханссон, П. Персон. – М.: Мир, 1978.
10. Фортгов, В.Е. Уравнения состояния вещества: от идеального газа до кварк-глюонной плазмы / В.Е. Фортгов. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013.
11. Куропатенко, В.Ф. Модели механики сплошных сред / В.Ф. Куропатенко. – Челябинск: Издательство ЧелГУ, 2007.
12. Ковалев, Ю.М. Математическое моделирование тепловой составляющей уравнения состояния молекулярных кристаллов / Ю.М. Ковалев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2013. – Т. 6, № 1. – С. 34–42.
13. Антонов, В.А. Моделирование взрыва шнурового заряда в пологе леса при отсутствии пожара / В.А. Антонов, А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев, Л.Ю. Наймушина // Физика горения и взрыва. – 1993. – Т. 29, № 4. – С. 115–123.
14. Воскобойников, И.М. Обобщенная ударная адиабата органических жидкостей / И.М. Воскобойников, А.Н. Афанасенков, В.М. Богомоллов // Физика горения и взрыва. – 1967. – Т. 3, № 4. – С. 585–593.
15. Рихтмайер, Р. Разностные методы решения краевых задач / Р. Рихтмайер, К. Мортон. – М.: Мир, 1972.

16. Ивандаев А.И. Об одном способе введения «псевдовязкости» и его применении к уточнению разностных решений уравнений гидродинамики // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1975. – Т. 15, № 2. – С. 523–527.

Фарит Гареевич Магазов, аспирант, кафедра «Вычислительная механика», Южно-Уральский государственный университет (г. Челябинск, Российская Федерация), magazov_farit@mail.ru.

Елена Сергеевна Шестаковская, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра «Вычислительная механика», Южно-Уральский государственный университет (г. Челябинск, Российская Федерация), leshest@list.ru.

Поступила в редакцию 10 июля 2018 г.

MSC 76L05

DOI: 10.14529/mmp180412

MATHEMATICAL MODELLING OF POSSIBLE MECHANISMS FOR THE FORMATION OF HOT SPOTS

F.G. Magazov¹, E.S. Shestakovskaya¹

¹South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mails: magazov_farit@mail.ru, leshest@list.ru

This paper is devoted to the study of the consequences of an initiating shock propagating through a condensed substance on a free surface. To close the laws of conservation of mass, momentum and internal energy, the equation of state of a condensed substance was constructed. The form of this equation of state corresponded to the form of the equation of state of Mie–Grüneisen with the separation of pressure and internal energy into thermal and cold parts. The ratio of the thermal part of the pressure to the thermal part of the internal energy is determined by the Grüneisen coefficient, which in this work is a constant. The cold part of the pressure was described by potential in Theta form. The analysis of the results presented in the work shows that after the shock reaches the free surface, a strong rarefaction wave begins to propagate into the condensed matter, which causes the pressure to drop in the condensed matter and the stress greatly increases, which can lead to a discontinuity of the material and appearance of a separate microparticle. This confirmed the assumption that hot spots could appear as a result of the warming up and burning of the smallest droplets of condensed explosive during the collapse of a gas bubble.

Keywords: mathematical model; equation of state; continuity; hot spot; shock.

References

1. Nigmatulin R.I. *Osnovy mekhaniki sploshnykh sred* [Fundamentals of Continuum Mechanics]. Moscow, Nauka, 1978. (in Russian)
2. Kraiko A.N., Nigmatulin R.I., Starkov V.K., Sternin L.B. *Mekhanika mnogofaznykh sred* [Mechanics of Multiphase Media]. *Itogi nauki i tekhniki. Gidromekhanika*, 1973, vol. 6, pp. 93–174. (in Russian)
3. Yanenko N.N., Solouhin R.I., Papyrin A.N., Fomin V.M. *Sverkhzvukovye dvukhfaznye techeniya v usloviyakh skorostnoj neravnovesnosti chastits* [Supersonic Two-Phase Flows Under Conditions of Speed Nonequilibrium of Particles]. Novosibirsk, Nauka, 1980. (in Russian)

4. Kovalev Yu.M., Kuropatenko V.F. Analysis of the Invariance of Some Mathematical Models of Multi-Media. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematics, Mechanics, Physics*, 2012, no. 11, pp. 4–7. (in Russian)
5. Kovalev Yu.M., Kovaleva E.A. Mathematical Analysis of the Conservation Equations of Two-Phase Mixtures. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2014, vol. 7, no. 2, pp. 29–37. (in Russian) DOI: 10.14529/mmp140202
6. Orlenko L.P. *Fizika vzryva i udara* [Explosion and Impact Physics]. Moscow, Fizmatlit, 2008. (in Russian)
7. Bowden F.P., Yoffe A.D. *Initiation and Growth of Ex-Explosion in Liquids and Solids*. Cambridge, Cambridge University Press, 1952.
8. Dubovik A.V., Bobolev V.K. *Chuvstvitel'nost' zhidkikh vzryvchatykh sistem k udaru* [Sensitivity of Liquid Explosive Systems to Impact]. Moscow, Nauka, 1978. (in Russian)
9. Johansson C.H., Persson P.A. *Detonatsiya vzryvchatykh veshhestv* [Explosive Detonation]. Moscow, Nauka, 1978. (in Russian)
10. Fortov V.E. *Uravneniya sostoyaniya veshhestva: ot ideal'nogo gaza do kvark-glyuonnoj plazmy* [Equations of State of Matter: from an Ideal Gas to a Quark-Gluon Plasma]. Moscow, Fizmatlit, 2013. (in Russian)
11. Kuropatenko V.F. *Modeli mekhaniki sploshnykh sred* [Models of Continuum Mechanics]. Chelyabinsk, CSU, 2007. (in Russian)
12. Kovalev Yu.M. Mathematical Modelling of the Thermal Component of the Equation of State of Molecular Crystals. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2013, vol. 6, no. 1, pp. 34–42. (in Russian)
13. Antonov V.A., Grishin A.M., Kovalev Yu.M., Naimushina L.Yu. Modeling Primer Cord Detonation in a Forest Canopy Without a Fire. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 1993, vol. 29, no. 4, pp. 527–534.
14. Voskoboynikov I.M., Afanasenkov A.N., Bogomolov V.M. Generalized Shock Adiabatic for Organic Liquids. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 1967, vol. 3, no. 4, pp. 359–364.
15. Richtmyer R.D., Morton K.W. *Difference Methods for Initial-Value Problems*. N.Y., Interscience, 1967.
16. Ivandaev A.I. A Method of Introducing Pseudoviscosity and Its Use for Improving the Difference Solutions of Hydrodynamic Equations. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1975, vol. 15, no. 2, pp. 238–242. DOI: 10.1016/0041-5553(75)90063-4

Received July 10, 2018