



## Modelowanie procesu przejścia palenia w detonację w stałych materiałach wybuchowych

WALDEMAR A. TRZCIŃSKI

Wojskowa Akademia Techniczna, Wydział Nowych Technologii i Chemii, Instytut Chemii,  
00-908 Warszawa, ul. S. Kaliskiego 2

**Streszczenie.** W pracy przedstawiono, zaczerpnięte z literatury, modele teoretyczne opisujące proces przejścia palenia w detonację w odlewanych materiałach wybuchowych. Zaprezentowano jednowymiarowy model palenia (deflagracji) zgodny z klasyczną teorią Chapmana-Jougueta i model palenia w warunkach zerowej prędkości masowej za frontem fali oraz omówiono zjawiska fizyczne towarzyszące przyspieszaniu fali płomienia w stałych materiałach wybuchowych. Przedstawiono wyniki obliczeń dla odlewanych, kruszących materiałów wybuchowych. Wykorzystano model przyspieszania fali deflagracji do oszacowania czasu i drogi, po jakich proces palenia prowadzi do pojawienia się fali uderzeniowej w inicjujących materiałach wybuchowych. Przeanalizowano wpływ szybkości palenia oraz właściwości fizycznych materiału na wielkość drogi przejścia palenia w detonację.

**Słowa kluczowe:** materiały wybuchowe, deflagracja, modelowanie przejścia palenia w detonację  
**Symbole UKD:** 662.1/4

### 1. Wstęp

Z ogromnej ilości wyników badań doświadczalnych procesu przejścia palenia w detonację (PPD; ang. *Deflagration-to-Detonation Transition* — DDT) w skondensowanych materiałach wybuchowych wynikają następujące wnioski [1]:

- najważniejszą różnicą w procesie PPD między inicjującymi i kruszącymi materiałami wybuchowymi jest szybkość przejścia palenia w detonację — w przypadku materiałów inicjujących proces ten przebiega dużo szybciej,

- ponieważ różnica ta ma raczej charakter ilościowy, a nie jakościowy, wszystkie relacje wyprowadzone dla kruszących materiałów wybuchowych mogą być również zastosowane do materiałów inicjujących,
- zdecydowanie łatwiej jest zbudować model ilościowy dla procesu PPD w odlewanych materiałach wybuchowych niż w materiałach porowatych.

Pierwszy wniosek wypływa z samej natury materiałów wybuchowych inicjujących i kruszących. Od inicjujących materiałów wymaga się, aby ulegały gwałtownej detonacji, jeśli tylko zostaną poddane działaniu impulsu cieplnego, podczas gdy w kruszących materiałach detonacja inicjowana jest głównie za pomocą fali uderzeniowej. Powszechnie uważa się, że im szybciej palenie przechodzi w detonację, tym lepszy jest materiał inicjujący. Łatwość przejścia palenia w detonację jest również słabością inicjującego materiału wybuchowego, ponieważ przypadkowe jego zapalenie prowadzi do detonacji.

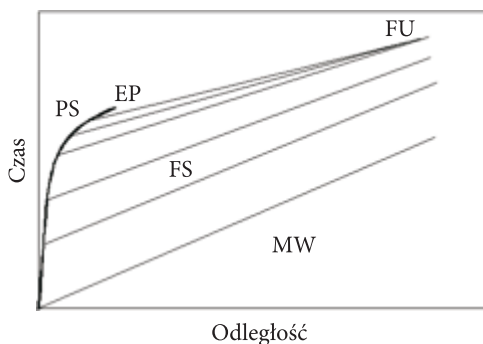
Drugi wniosek jest rezultatem zaobserwowania wielu podobieństw między inicjującymi i kruszącymi materiałami w procesie PPD. Oba rodzaje materiałów podlegają temu procesowi, przy czym w przypadku kruszących materiałów wybuchowych przejście to trwa dłużej i wymaga zamknięcia ładunku w ciężkiej otoczce.

Ostatni wniosek wynika z badań eksperymentalnych procesu PPD w odlewanych, kruszących materiałach wybuchowych i dobrej zgodności co do rzędu wielkości eksperymentalnie określonych czasu i drogi rozwoju detonacji z danymi uzyskanymi z jednowymiarowego modelu Maceka [2]. Nie istnieje odpowiedni do niego model przejścia palenia w detonację w przypadku porowatych materiałów wybuchowych. Dane eksperymentalne potwierdzają istnienie w tych materiałach konwekcyjnego frontu płomienia o dużej powierzchni i w rezultacie tworzenie się złożonego pola przepływu, wpływającego na proces PPD. W chwili obecnej nie istnieje prosty model fizyczny uwzględniający złożoność PPD w porowatych materiałach wybuchowych.

W niniejszej pracy zastosowano jednowymiarowy model, zaproponowany w pracy [2] i rozwinięty w pracy [1], do przewidywania drogi rozwoju palenia w detonację w inicjujących materiałach wybuchowych. W pierwszej kolejności omówiono model Maceka rozwoju palenia w detonację w odlewanych, kruszących materiałach wybuchowych. Przedstawiono również analizę krytyczną tego modelu dokonaną w pracy [1]. Następnie zaprezentowano jednowymiarowy model palenia (deflagracji) zgodny z klasyczną teorią Chapmana-Jougueta (CJ) i omówiono zjawiska fizyczne towarzyszące przyspieszaniu fali płomienia w stałych materiałach wybuchowych. Przedstawiono szczegółowo modele przejścia palenia w detonację analizowane w pracy [1] oraz prezentowane tam wyniki obliczeń. Na zakończenie wykorzystano model przyspieszania fali deflagracji do oszacowania czasu i drogi, po jakich proces palenia doprowadzi do pojawienia się fali detonacyjnej w inicjujących materiałach wybuchowych. Przeanalizowano wpływ szybkości palenia oraz właściwości fizycznych materiału na wielkość drogi przejścia palenia w detonację.

## 2. Model Maceka przejścia palenia w detonację

Jeżeli fala deflagracji zostanie zainicjowana na dnie zamkniętej rury, to propaguje się w głąb rury, spalając materiał wybuchowy i generując strumień gazów w kierunku przeciwnym do ruchu fali. Ponieważ gazy te zatrzymują się na ścianie zamykającej dno rury, ich energia kinetyczna zmienia się w energię wewnętrzną. Wzrastające ciśnienie w gazie jest źródłem powstania fal sprężania, które oddziałują z falą deflagracji i przyspieszają ruch płomienia (rys. 1). Poruszający się coraz szybciej front spalania generuje z kolei fale sprężania w nieprzereagowanym materiale wybuchowym przed frontem płomienia, co powoduje powstanie złożonego, niestacjonarnego przepływu. Efektem wzajemnego oddziaływania fal sprężania jest powstanie wewnątrz materiału fali uderzeniowej, która inicjuje reakcje prowadzące do wygenerowania fali detonacji. Amplituda inicjującej fali uderzeniowej zależy od rodzaju materiału wybuchowego.



Rys. 1. Obraz przejścia palenia w detonację na płaszczyźnie fazowej odległość–czas: MW — materiał wybuchowy; PS — produkty spalania; FP — front płomienia; FS — fale sprężania; FU — fala uderzeniowa

Mechanizm wzrostu ciśnienia przed frontem fali płomienia zależy przede wszystkim od rodzaju paliwa. W gazach i prawdopodobnie w stałych materiałach o wysokiej porowatości dominującymi zjawiskami są turbulencja i dyfuzja gorących produktów spalania. W jednorodnych materiałach wybuchowych procesy te są nieobecne, a głównym mechanizmem wzrostu ciśnienia jest laminarne spalanie, którego szybkość zależy właśnie od ciśnienia [3].

Warunki niezbędne do uformowania się frontu uderzeniowego w spalającym się materiale wybuchowym są ściśle określone [2]. Po pierwsze, niezbędne jest ograniczenie wypływu do tyłu powstających produktów spalania. Zapewnia to wzrost ciśnienia działającego na materiał wybuchowy i wygenerowanie w nim zaburzeń w kierunku propagacji fali płomienia. Czoło tych zaburzeń, zgodnie z „mechanizmem przyspieszającego tłoka”, przekształca się w uderzeniowy front. Jeśli rozlot produktów spalania jest niczym nieograniczony, to ciśnienie nie wzrośnie w stopniu

wystarczającym, by w materiale wybuchowym powstała fala uderzeniowa. Po drugie, wzrost ciśnienia musi być gwałtowny. Ponieważ fale sprężania mają doganiać się i generować falę uderzeniową wewnątrz ładunku, czas niezbędny do wzrostu ciśnienia od wartości początkowej do wartości na czole inicjującej fali uderzeniowej musi być mniejszy niż czas przejścia fali dźwiękowej przez ładunek.

Macek [2] zaproponował pierwszą generację eksperymentalnych i teoretycznych metod badania zjawiska PPD w kruszących materiałach wybuchowych. Mierzył zależność ciśnienia od czasu w produktach spalania materiału wybuchowego zamkniętego w metalowej rurze oraz czas i miejsce pojawienia się w materiale fali detonacyjnej. Zmierzoną zależność ciśnienia w produktach spalania  $p$  od czasu  $t$  aproksymował funkcją:

$$p = p_0 e^{at}, \quad (1)$$

gdzie  $p_0$  i  $a$  oznaczają stałe. Założył, że ciśnienie w produktach spalania jest równe ciśnieniu w materiale wybuchowym.

Kompresję stałego materiału wybuchowego opisał równaniem Taity:

$$p = \frac{\rho_0 c_0^2}{n} \left[ \left( \frac{\rho}{\rho_0} \right)^n - 1 \right], \quad (2)$$

gdzie  $\rho$ ,  $\rho_0$  i  $c_0$  oznaczają gęstość, gęstość początkową i prędkość dźwięku materiału wybuchowego,  $n$  jest stałą.

Ruch fal sprężania w materiale wybuchowym obliczono w pracy [2] metodą charakterystyk. Macek przyjął, że  $n = 3$ , dzięki czemu charakterystyki  $C_+$  w fali sprężania są liniami prostymi (rys. 1). Punkt przecięcia się charakterystyk, na których różnica ciśnienia wynosi kilka kilobarów, przyjęto za początek formowania się fali uderzeniowej o amplitudzie zdolnej do pobudzenia materiału wybuchowego do detonacji. Zainicjowana fala detonacyjna przemieszcza się w materiale w kierunku zgodnym z propagacją frontu płomienia (detonacja) oraz w kierunku przeciwnym (retonacja).

Stosując takie przybliżenie, Macek uzyskał dobrą zgodność między obliczonymi czasami i odległościami przejścia palenia w detonację a wartościami zmierzonymi (czas  $\sim 100$   $\mu$ s, dystans  $\sim 12$  cm) dla dwóch kruszących materiałów wybuchowych — diazotanu dietylenonitroaminy (DINA) oraz pentolitu (pentryt/trotyl 50/50) [2]. Macek podjął również próbę wyjaśnienia zaobserwowanej eksponentalnej zależności między ciśnieniem i czasem za frontem, wykorzystując jednowymiarowy, adiabatyczny model palenia. Zależność liniowej prędkości frontu płomienia  $U$  od ciśnienia  $p$  opisał zależnością:

$$U = \beta p^\lambda, \quad (3)$$

gdzie  $\beta$  i  $\lambda$  oznaczają stałe. Autor pracy [2] przyjął, że dla badanych materiałów  $\lambda = 1$  oraz  $\beta = 10$  cm/s kbar. Otrzymaną zależność ciśnienia od czasu dopasował do równania (1) poprzez stałą proporcjonalności, która uwzględniała wielkość powierzchni frontu płomienia.

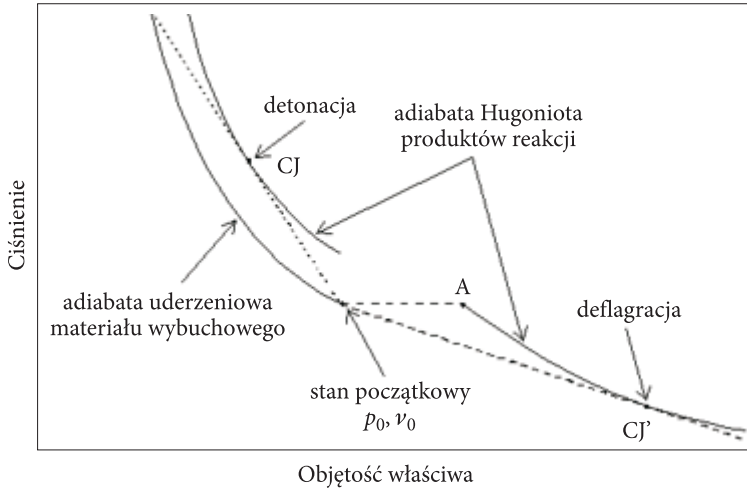
Chociaż Macek uzyskał dobrą zgodność ilościową między danymi eksperymentalnymi i obliczonymi dla dwóch kruszących materiałów wybuchowych, to według autorów pracy [1] jego model teoretyczny posiada słabe punkty. Po pierwsze, zakładając, że ciśnienia w produktach spalania i w materiale wybuchowym są sobie równe, Macek pominął spadek ciśnienia na froncie fali deflagracji, który może być bardzo duży, jeśli proces palenia osiąga reżim Chapmana-Jougueta. Zgodnie z teorią CJ, ciśnienie w nieprzereagowanym materiale może być znacznie wyższe od ciśnienia w produktach palenia. Po drugie, przyjęta postać zależności liniowej prędkości spalania od ciśnienia dobrze opisuje eksperymentalną zależność tylko do ciśnienia około 1 kbar. Rzeczywista relacja szybkości spalania i ciśnienia w procesie przyspieszającej fali deflagracji, która generuje falę detonacyjną, różni się od prawa szybkości spalania (3). Trzecim słabym punktem analizy Maceka było pominięcie pędu przekazywanego do produktów reakcji na froncie fali deflagracji. W przypadku zamkniętej rury, energia związana z ruchem cząstek produktów wpływa w rzeczywistości na przyspieszenie czoła płomienia.

### 3. Modele przejścia palenia w detonację uwzględniające właściwości fali deflagracji

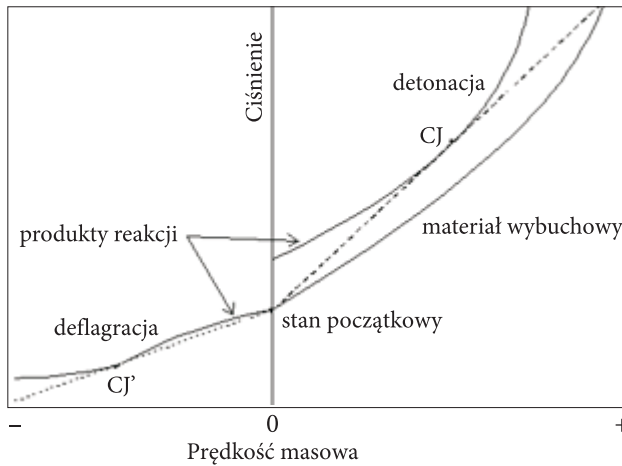
Na rysunkach 2 i 3 przedstawiono na płaszczyznach ciśnienie–objętość właściwa i ciśnienie–prędkość masowa krzywe Hugoniota dla produktów reakcji materiału wybuchowego w przypadku procesów detonacji i deflagracji. Górne krzywe i punkt CJ odpowiadają detonacji, zaś krzywe dolne i punkt CJ' związane są z deflagacją. Parametry punktu CJ' odpowiadają stacjonarnej fali spalania propagującej się w materiale wybuchowym.

Jak wcześniej stwierdzono, fala deflagracji zainicjowana na dnie zamkniętej rury przemieszcza się wzdłuż rury i spala materiał wybuchowy oraz generuje ruch produktów reakcji w kierunku przeciwnym. Produkty reakcji wyhamowywane są na dnie rury i ich energia kinetyczna zamienia się w energię wewnętrzną. W rezultacie wzrasta ciśnienie i w produktach propagują się fale sprężania, powodując przyspieszenie fali deflagracji. Proces przyspieszania frontu płomienia generuje z kolei fale sprężania w materiale wybuchowym, co prowadzi do powstania złożonego niestacjonarnego przepływu przed frontem. Stan początkowy materiału wybuchowego jest więc stanem materiału sprężonego.

Ten złożony przepływ związany z przyspieszającą falą deflagracji został zilustrowany na rysunku 4 za pomocą diagramów prędkość masowa–odległość [1]. Dla

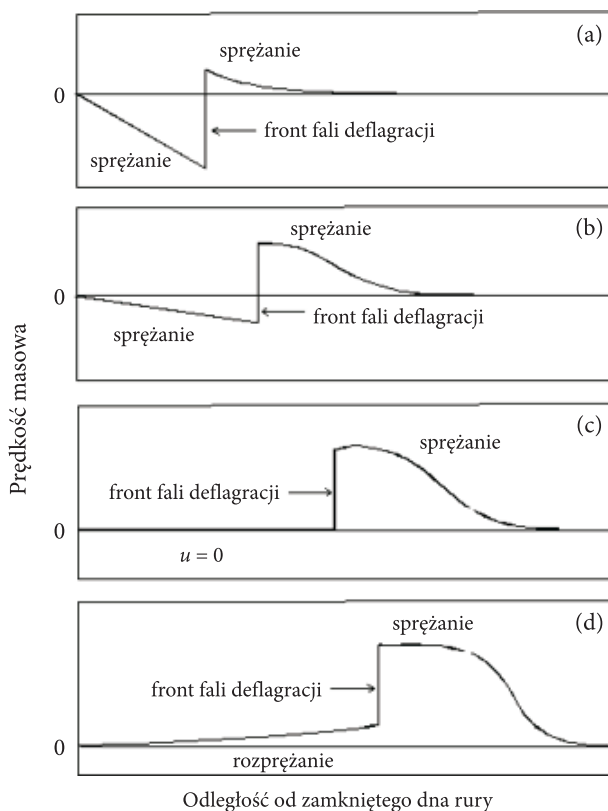


Rys. 2. Diagram ciśnienie–objętość właściwa dla deflagracji i detonacji



Rys. 3. Diagram ciśnienie–prędkość masowa dla deflagracji i detonacji

uproszczenia front fali deflagracji został przedstawiony jako nieciągłość, chociaż w rzeczywistości ma on skończoną szerokość. Na rysunkach 4a i 4b prędkość masowa produktów reakcji na froncie fali deflagracji ma wartość ujemną i konieczne jest wystąpienie obszaru sprężania by osiągnęła ona wartość zero na dnie rury. Rysunek 4c przedstawia przypadek, w którym spadek prędkości masowej na froncie fali deflagracji jest dokładnie równy prędkości masowej materiału sprężonego przed frontem. W następnej fazie przyspieszania fali deflagracji (rys. 4d) prędkość masowa za frontem fali jest dodatnia i niezbędne jest powstanie obszaru rozprężania, by spełniony był warunek brzegowy na dnie rury. Jednakże, gdy za frontem



Rys. 4. Diagram prędkość masowa–odległość dla przyspieszającej fali deflagracji

fali nie ma strefy sprężania, wówczas nie ma również mechanizmu przyspieszania fali deflagracji związanego z procesem sprężania produktów gazowych.

Chociaż dokładne rozwiązanie złożonego, niestacjonarnego przepływu generowanego przez falę deflagracji w zamkniętej rurze jest bardzo trudne, to istnieją dwa modele analityczne procesu przyspieszania fali spalania, które umożliwiają oszacowanie górnej i dolnej granicy zmian prędkości spalania w stosunkowo prosty sposób. Dla fali detonacyjnej tylko punkt CJ odpowiada stabilnemu procesowi, ale w przypadku fali deflagracji stan końcowy produktów może określać każdy punkt na krzywej Hugoniota pomiędzy punktami A i CJ' (rys. 2-3), czyli na tzw. gałęzi słabej deflagracji. Punkt A odpowiada hipotetycznej deflagracji przy stałym ciśnieniu, w czasie której prędkość masowa nie zmienia się, zaś punkt CJ' deflagracji, dla której prędkość fali spalania, prędkość masowa i spadek ciśnienia są największe.

Biorąc pod uwagę opisany wyżej mechanizm przyspieszania oraz właściwości fali deflagracji, autorzy pracy [1] rozpatrywali dwa analityczne modele opisujące proces przyspieszania płomienia. W pierwszym z nich, zaproponowanym przez

Adamsa i Packa [4] do opisu fali deflagracji w gazach, występuje obszar sprężania materiału wybuchowego zakończony falą deflagracji, której prędkość jest taka, że pęd skompresowanego materiału wybuchowego jest dokładnie równy spadkowi pędu na froncie fali, a prędkość masowa produktów reakcji wynosi zero (rys. 4c). W modelu tym nie muszą wystąpić fale rozrzedzenia lub sprężania w produktach reakcji, by spełniony został warunek graniczny na dnie rury. Ponieważ zmiana prędkości cząstek z odległością za frontem fali spalania wynosi zero, zmiana w czasie ciśnienia na lewej granicy musi być również równa zero. Chociaż w modelu tym spełnione jest prawo zachowania pędu, to nie jest on fizycznie poprawny, ponieważ nie jest możliwe w tym modelu przyspieszanie płomienia i nie występuje mechanizm wzrostu ciśnienia na dnie rury. Jednakże model Adamsa-Packa umożliwia wyznaczenie dolnych wartości prędkości frontu płomienia i spadku ciśnienia na froncie przyspieszającej fali deflagracji, gdyż dla każdej fali propagującej się szybciej, na jej froncie pojawia się spadek prędkości masowej i możliwa jest realizacja mechanizmu przyspieszania płomienia.

W drugim modelu zakłada się, że deflagracja jest zawsze falą Chapmana-Jougueta z największą możliwą prędkością propagacji i największym spadkiem ciśnienia na froncie. Model ten umożliwia opis mechanizmu przyspieszania płomienia zgodnie ze schematem pokazanym na rysunku 4. Zastosowany został po raz pierwszy przez Troshina do badania procesu PPD w gazach [5]. Interesującym stanem deflagracji, gdy oba modele przewidują te same wartości prędkości oraz ciśnienia w produktach reakcji, jest przypadek pokazany na rysunku 4c. W przypadku deflagracji CJ stan ten odpowiada sytuacji, gdy kończy się etap przyspieszania płomienia i generowania nowych fal sprężania z produktów spalania do materiału wybuchowego. W tabeli 1 przedstawiono, obliczone w pracy [1], parametry tego stanu dla trotylu i pentolitu. Otrzymane wartości fali sprężania, 95 kbar dla trotylu i 129,5 kbar dla pentolitu, są zbyt duże, aby mogły być kryterium przejścia palenia w detonację, ponieważ w przypadku pentolitu jego wrażliwość na falę uderzeniową wynosi około 20 kbar, zaś odlewany trotyl może być zainicjowany falą uderzeniową o amplitudzie 60 kbar. W pentolicie przejście palenia w detonację jest stosunkowo łatwe, w trotylu jest niemożliwe. Zatem istnieje jakieś inne kryterium przyspieszania płomienia, które określa, czy w odlewanym materiale wybuchowym wystąpi przejście palenia w detonację.

TABELA 1

Parametry fali deflagracji CJ z zerową prędkością masową za frontem fali

Parametry fali deflagracji	Odlewany trotyl	Pentolit
Ciśnienie fali sprężania w materiale wybuchowym [kbar]	95,0	129,5
Prędkość fali deflagracji CJ [mm/μs]	3,116	3,504
Ciśnienie za frontem fali deflagracji CJ [kbar]	43,5	63,4



W pracy [1] wykorzystano oba modele przyspieszania płomienia do obliczenia przejścia palenia w detonację w pentolicie. Do wyznaczenia czasu i odległości powstania fali uderzeniowej w materiale wybuchowym przed frontem płomienia zastosowano metodę charakterystyk. Zależność ciśnienia w produktach spalania pentolitu od czasu dla ciśnienia poniżej 1 kbar opisano relacją Maceka [1] z parametrami  $p_0 = 0,08$  kbar,  $a = 0,12$  1/ $\mu$ s oraz dla ciśnienia powyżej 1 kbar związkiem podanym w pracy [6]:

$$p_2 = (1 \text{ kbar}) e^{0,08856(t-21,05)}, \quad (4)$$

gdzie  $p_2$  oznacza ciśnienie za frontem fali deflagracji. Czas  $t$  wyrażony jest w mikrosekundach.

Do opisu właściwości fizycznych materiału wybuchowego wykorzystano równanie Taity (2) izentropowego sprężania z  $n = 3$ . Wykorzystując związki wzdłuż ujemnych charakterystyk  $C_-$ , wyznaczono w sprężonym materiale wybuchowym przed frontem fali deflagracji prędkość dźwięku  $c_1$ , prędkość masową  $u_1$ , gęstość  $\rho_1$  i energię wewnętrzną  $e_1$  na prostoliniowych charakterystykach dodatnich  $C_+$  w funkcji ciśnienia  $p_1$ :

$$\rho_1 = \rho_0 \left( 1 + \frac{3p_1}{\rho_0 c_0^2} \right)^{1/3}, \quad (5)$$

$$u_1 = c_0 \left[ \left( 1 + \frac{3p_1}{\rho_0 c_0^2} \right)^{1/3} - 1 \right], \quad (6)$$

$$u_1 + c_1 = c_0 \left[ 2 \left( 1 + \frac{3p_1}{\rho_0 c_0^2} \right)^{1/3} - 1 \right], \quad (7)$$

$$e_1 - e_0 = \frac{p_1}{2\rho_1} - \frac{c_0^2}{2} \left( 1 - \frac{\rho_0}{\rho_1} \right), \quad (8)$$

gdzie  $\rho_0$ ,  $c_0$  są parametrami z równania (2),  $e_0 = c_0^2/2$ .

Prawa zachowania strumieni masy, impulsu i energii na froncie fali deflagracji można zapisać w następującej postaci:

$$\rho_1 (w - u_1) = \rho_2 (w - u_2), \quad (9)$$

$$p_1 + \rho_1 (w - u_1)^2 = p_2 + \rho_2 (w - u_2)^2, \quad (10)$$

$$e_1 + \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{(w - u_1)^2}{2} + q = e_2 + \frac{p_2}{\rho_2} + \frac{(w - u_2)^2}{2}, \quad (11)$$

gdzie indeks 2 odnosi się do parametrów za frontem deflagracji,  $w$  oznacza prędkość fali deflagracji, zaś  $q$  jest ciepłem reakcji.

Właściwości fizyczne gazowych produktów reakcji opisano modelem gazu politropowego, dla którego prawdziwe są związki:

$$\frac{p_2}{\rho_2^k} = \text{const}, \quad (12)$$

$$e_2 = \frac{p_2}{(k-1)\rho_2}, \quad (13)$$

gdzie  $k$  jest wykładnikiem adiabatycznego rozprężania produktów reakcji. W pracy [1] zaproponowano, by jego wartość wyznaczać z relacji łączącej parametry detonacji CJ:

$$p_{CJ} = \frac{\rho_0 D^2}{k+1}, \quad (14)$$

gdzie  $D$  oznacza prędkość detonacji.

W przypadku modelu Adamsa-Packa prędkość masowa  $u_2$  za frontem fali spalania wynosi zero. Wówczas z praw zachowania (9)-(11) można wyznaczyć prędkość propagacji fali deflagracji w funkcji parametrów oznaczonych indeksem 1:

$$w^2 + \frac{w}{u_1} \left[ (k-1)(q + e_1) - \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{k-3}{2} u_1^2 \right] - (k-1) \left( q + e_1 + \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{u_1^2}{2} \right) = 0. \quad (15)$$

Po określeniu z równania (15) wartości prędkości fali deflagracji  $w$  dla zadanego ciśnienia  $p_1$ , można obliczyć wartości  $p_2$  i  $\rho_2$  z równań (9)-(10), zakładając  $u_2 = 0$ . W pracy [1] dla pentolitu przyjęto następujące dane:  $\rho_0 = 1,67 \text{ g/cm}^3$ ,  $c_0 = 2,43 \text{ mm/}\mu\text{s}$ ,  $q = 1160 \text{ cal/g}$ ,  $k = 2,598$ . Wyniki obliczeń dla fal deflagracji przedstawiono w tabeli 2.

Obliczone wartości prędkości fali deflagracji są ok. 300 razy większe niż prędkości otrzymane ze wzoru (3) opisującego zależność liniowej prędkości spalania od ciśnienia. W pracy [7] zaobserwowano, że prędkość fali deflagracji w materiałach wybuchowych jest rzędu 1-2 mm/ $\mu$ s, co dobrze koreluje z wynikami podanymi w czwartej kolumnie tabeli 2. Jest to potwierdzenie krytycznej uwagi autorów pracy [1] odnośnie zaproponowanej przez Maceka ekstrapolacji danych eksperymentalnych z pomiarów liniowej prędkości spalania do ciśnień powyżej 1 kbar. Z tabeli 2 wynika również, że dla ciśnień do 20 kbar ciśnienia  $p_1$  i  $p_2$  różnią się nieznacznie,

TABELA 2

Wyniki obliczeń dla fal deflagracji dla pentolitu [1] — model Adamsa-Packa

$p_1$ [kbar]	$p_2$ [kbar]	$u_1$ [mm/ $\mu$ s]	$w$ [mm/ $\mu$ s]	$u_1 + c_1$ [mm/ $\mu$ s]
1	0,998	$2,440 \cdot 10^{-2}$	$2,489 \cdot 10^{-2}$	2,479
2	1,9984	$4,831 \cdot 10^{-2}$	$5,023 \cdot 10^{-2}$	2,527
4	3,988	$9,481 \cdot 10^{-2}$	$1,023 \cdot 10^{-1}$	2,620
7	6,937	$1,615 \cdot 10^{-1}$	$1,836 \cdot 10^{-1}$	2,753
10	9,815	$2,249 \cdot 10^{-1}$	$2,700 \cdot 10^{-1}$	2,880
20	18,75	$4,171 \cdot 10^{-1}$	$5,700 \cdot 10^{-1}$	3,264
30	26,36	$5,864 \cdot 10^{-1}$	$8,860 \cdot 10^{-1}$	3,603
40	32,56	$7,385 \cdot 10^{-1}$	1,201	3,907
70	44,47	1,1244	2,054	4,678
100	50,28	1,4410	2,738	5,311
123,8	52,62	1,6597	3,186	5,749

co oznacza, że model Adamsa-Packa w tym przedziale jest modelem zbliżonym do modelu deflagracji przy stałym ciśnieniu.

Trajektorię ruchu frontu fali spalania można obliczyć ze wzoru:

$$x_w(t) = \int_0^t w(\tau) d\tau, \quad (16)$$

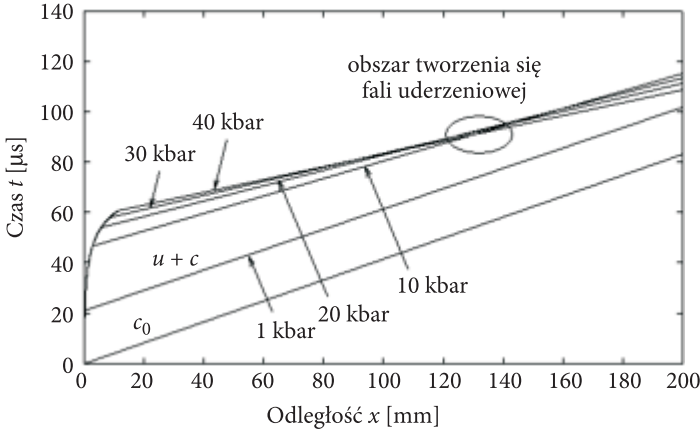
gdzie  $w(t)$  określono z zależności  $w$  od  $p_2$  z tabeli 2 oraz z zależności  $p_2$  od czasu z relacji (4). Ruch frontu fali spalania i kompresję materiału wybuchowego na płaszczyźnie  $x-t$  pokazano na rysunku 5.

Charakterystyki  $C_+$  ( $u+c$ ) przecinają się w obszarze położonym w odległości ok. 130 mm od dna rury po czasie ok. 90  $\mu$ s od momentu zainicjowania spalania pentolitu. Przyjmuje się, że w punkcie przecięcia się charakterystyk generowana jest fala uderzeniowa zdolna do pobudzenia materiału wybuchowego do detonacji.

Oszacowane za pomocą modelu Adamsa-Packa wartości parametrów procesu przejścia palenia porównano z wynikami obliczeń wykonanymi w oparciu o model deflagracji CJ w materiale wybuchowym skompresowanym izentropowo przez fale sprężania. Na froncie fali płomienia spełniony musi być warunek CJ –  $w = u_2 + c_2$ , czyli:

$$(w - u_2)^2 = k \frac{p_2}{\rho_2}. \quad (17)$$

Podstawiając związek (17) do równań (9)-(11), otrzymuje się następujące wyrażenia na ciśnienie i gęstość za frontem fali spalania:



Rys. 5. Charakterystyki fali sprężania generowanej procesem spalania materiału wybuchowego zamkniętego w rurze dla modelu Adamsa-Packa

$$p_2 = (k-1)\rho_1(q+e_1) \left[ 1 - \sqrt{1 - \frac{(2q+2e_1+p_1/\rho_1)p_1}{\rho_1(k^2-1)(q+e_1)^2}} \right], \quad (18)$$

$$\rho_2^{-1} = \frac{(k-1)(q+e_1+p_1/\rho_1)}{k p_1} \left[ 1 + \sqrt{1 - \frac{k^2(2q+2e_1+p_1/\rho_1)p_1}{\rho_1(k^2-1)(q+e_1+p_1/\rho_1)^2}} \right]. \quad (19)$$

Prędkość frontu fali oblicza się następnie ze związku:

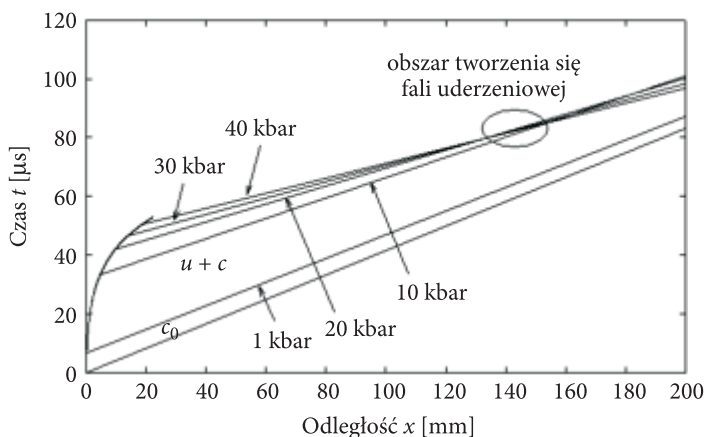
$$w = u_1 + \left( k \frac{p_2}{\rho_2} \right)^{1/2} \frac{\rho_2}{\rho_1}. \quad (20)$$

Wyniki obliczeń przedstawiono w tabeli 3 i na rysunku 6. Dla małych ciśnień początkowych  $p_1$  ciśnienie  $p_2$  za frontem fali deflagacji CJ jest dużo niższe od ciśnienia oszacowanego dla modelu Adamsa-Packa, zaś prędkość fali płomienia jest prawie dwa razy większa. Oznacza to, że fala deflagacji CJ w tym samym czasie przemieszcza się w materiale na większą odległość. Czas pojawienia się fali uderzeniowej w materiale wynosi ok. 80  $\mu$ s i jest nieznacznie mniejszy od czasu obliczonego dla modelu Adamsa-Packa (ok. 90  $\mu$ s), zaś odległość powstania fali uderzeniowej rośnie (ok. 140 mm na rysunku 6 wobec ok. 130 mm na rysunku 5). Ponieważ zastosowane modele teoretyczne umożliwiają obliczenie górnych i dolnych wartości parametrów przejścia palenia w detonację, krytyczny czas i odległość procesu PPD ograniczone będą tymi wartościami, jeśli izentropowe sprężanie pentolitu można opisać równaniem (2) z wykładnikiem  $n = 3$ .

TABELA 3

Wyniki obliczeń dla fal deflacji dla pentolitu [1] — model Chapmana-Jougueta

$p_1$ [kbar]	$p_2$ [kbar]	$u_2$ [mm/ $\mu$ s]	$w$ [mm/ $\mu$ s]
1	0,2799	-2,044	$4,500 \cdot 10^{-2}$
2	0,5637	-2,019	$8,910 \cdot 10^{-2}$
4	1,1426	-1,958	$1,750 \cdot 10^{-1}$
7	2,038	-1,870	$2,986 \cdot 10^{-1}$
10	2,966	-1,782	$4,170 \cdot 10^{-1}$
20	6,261	-1,5253	$7,767 \cdot 10^{-1}$
30	9,835	-1,3208	1,096
40	13,65	-1,1304	1,386
70	26,32	$-6,539 \cdot 10^{-1}$	2,130
100	38,62	$-2,247 \cdot 10^{-1}$	2,751
123,8	52,62	0	3,186



Rys. 6. Charakterystyki fali sprężania generowanej procesem spalania materiału wybuchowego zamkniętego w rurze dla modelu Chapmana-Jougueta

#### 4. Modelowanie przejścia palenia w detonację w inicjujących materiałach wybuchowych

W pracy [1] zastosowano prezentowane wyżej modele do obliczenia czasu i drogi przejścia palenia w detonację również w inicjującym materiale wybuchowym — azydku łożowiu. Na podstawie doświadczalnych danych literaturowych opisano zależność ciśnienia sprężonego materiału  $p_1$  od czasu w fali deflacji w azydku łożowiu. Do opisu właściwości fizycznych kryształu azydku łożowiu zastosowano

równanie Taity oraz uzyskany z danych eksperymentalnych związek między ciśnieniem i prędkością masową na froncie fali uderzeniowej. Ten ostatni wykorzystano do obliczenia prędkości masowej sprężonego azydku ołowiu:

$$u_1 = \frac{P_1}{\rho_0 c_0}, \quad (21)$$

gdzie:  $\rho_0 = 4,6 \text{ g/cm}^3$ ;  $c_0 = 2,15 \text{ mm}/\mu\text{s}$ .

W tym przypadku autorzy pracy [1] nie podają szczegółów rozwiązania problemu przejścia palenia w detonację. Tymczasem zastosowanie danych z adiabaty uderzeniowej do opisu izentropowego sprężania materiału wybuchowego jest grubym przybliżeniem. Ponadto w modelu pojawia się niejednoznaczność związana z obliczaniem w obszarze sprężania materiału prędkości masowej za pomocą wzoru (21), zaś prędkości dźwięku, energii wewnętrznej i gęstości z wykorzystaniem wzoru Taity (2).

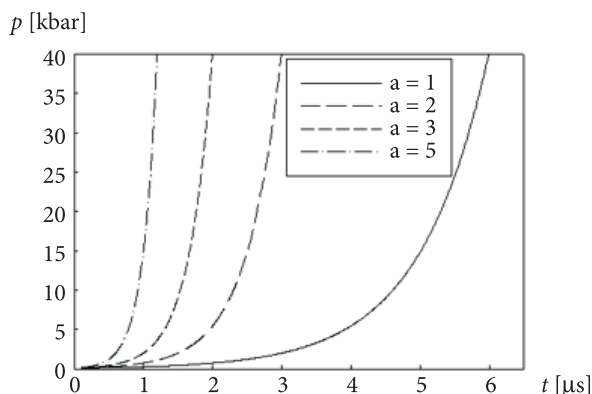
Obliczony dystans przejścia palenia w detonację w kryształach azydku ołowiu wyniósł ok. 2 mm, co jest zgodne z danymi eksperymentalnymi otrzymanymi dla kryształów azydku ołowiu o różnej grubości. W kryształach o grubości mniejszej od 2 mm nie stwierdzono zjawiska PPD, w grubszych taki proces zaobserwowano. Obliczone prędkości palenia dla obu modeli (Adamsa-Packa i CJ) są o rząd wielkości mniejsze niż prędkość 2,7 mm/ $\mu\text{s}$  zmierzona przez Chaudhri i Fielda [8]. Mimo zastrzeżeń prezentowanych wcześniej, w pracy [1] zastosowano również powyższy model do wykonania obliczeń procesu przyspieszania deflagracji w prasowanych ładunkach azydku ołowiu. Przyjęto następujące dane:  $\rho_0 = 3,4 \text{ g/cm}^3$ ,  $c_0 = 1,23 \text{ mm}/\mu\text{s}$ . W tym przypadku odległość do punktu powstania fali uderzeniowej wynosiła 0,9 mm. Porowatość jest przyczyną mniejszej prędkości dźwięku w prasowanym ładunku i stąd przecięcie się odpowiednich charakterystyk następuje szybciej.

Ze względu na ograniczoną ilość danych eksperymentalnych dotyczących inicjujących materiałów wybuchowych podejmiemy próbę zbadania wpływu szybkości spalania tych materiałów na proces PPD w hipotetycznym materiale wybuchowym. Mimo wcześniejszych uwag, podobnie jak w pracy [1], zastosujemy modele opracowane dla odlewanych materiałów wybuchowych. Przyjmujemy następujące parametry materiału inicjującego:  $\rho_0 = 1,4 \text{ g/cm}^3$ ,  $c_0 = 1,20 \text{ mm}/\mu\text{s}$ . Zaproponowana wartość  $\rho_0$  odpowiada gęstości zaprasowanych wybuchowych związków kompleksowych badanych w Zakładzie Materiałów Wybuchowych WAT [9], prędkość dźwięku jest zbliżona do prędkości prasowanego azydku ołowiu [1]. Ciepło spalania przykładowego związku kompleksowego  $q = 2000 \text{ cal/g}$  zaczerpnięto z pracy [10]. Założono, że wykładnik adiabaty produktów spalania  $k = 3,2$ . Wartość  $p_0$  z równania (1) przyjęto równą 0,1 kbar.

Zbadamy wpływ szybkości spalania materiału na proces PPD. Szybkość palenia zamkniętego materiału wybuchowego reprezentuje zależność ciśnienia od czasu (1).

Na rysunku 7 przedstawiono zmianę ciśnienia zgodną z równaniem (1) dla różnych wartości parametru  $a$ . Ciśnienie narasta do wartości ok. 40 kbar w czasie od 1 do 6  $\mu\text{s}$  przy zmianie  $a$  od 5 do 1.

Do wykonania obliczeń wykorzystano modele przyspieszania płomienia omawiane w poprzednim punkcie. W tabeli 3 przedstawiono wartości parametrów fal deflagracji w funkcji ciśnienia sprężonego materiału dla dwóch modeli: Adamsa-Packa oraz CJ. Zakres zmian ciśnienia  $p_1$  odpowiada amplitudom fal uderzeniowych prowadzących do detonacji w inicjujących materiałach wybuchowych (np. 6 kbar w przypadku azydku ołowiu [11]). Jak wcześniej stwierdzono, uzyskane prędkości frontu płomienia  $w$  i ciśnienia  $p_2$  w produktach spalania za frontem fali dla modeli Adamsa-Packa i CJ stanowią graniczne wartości tych parametrów w fali deflagracji w badanym materiale wybuchowym.



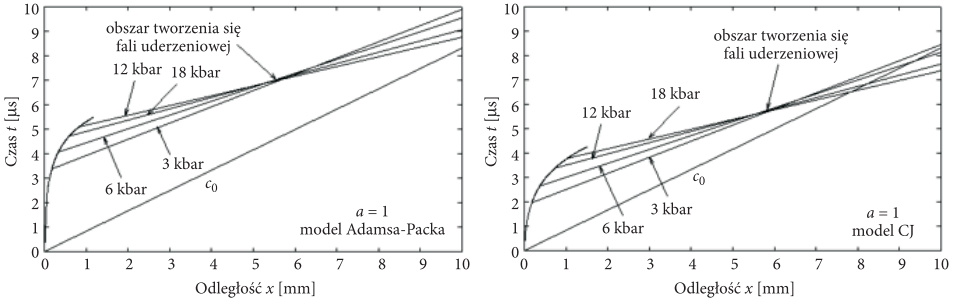
Rys. 7. Zależność ciśnienia w produktach spalania od czasu dla różnych wartości parametru  $a$  z równania (3)

TABELA 3

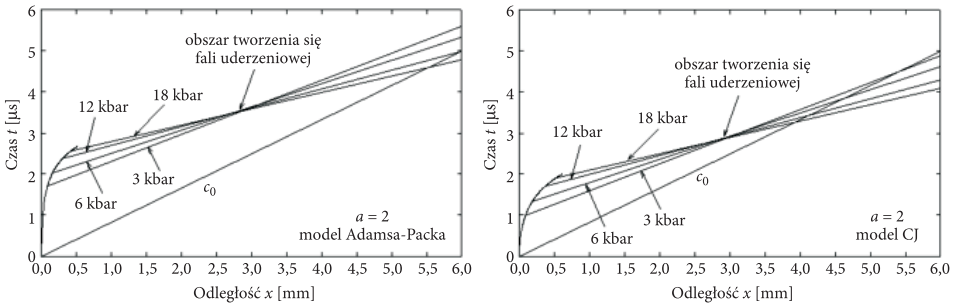
Wyniki obliczeń dla fal deflagracji dla przykładowego materiału inicjującego

$p_1$ [kbar]	$u_1$ [mm/ $\mu\text{s}$ ]	$u_1 + c_1$ [mm/ $\mu\text{s}$ ]	Model Adamsa-Packa ( $u_2 = 0$ )		Model CJ	
			$p_2$ [kbar]	$w$ [mm/ $\mu\text{s}$ ]	$p_2$ [kbar]	$w$ [mm/ $\mu\text{s}$ ]
1	$5,68 \cdot 10^{-2}$	1,313	0,9994	$5,75 \cdot 10^{-2}$	0,2392	$7,44 \cdot 10^{-2}$
3	0,157	1,514	2,987	0,162	0,7233	0,206
6	0,248	1,769	5,915	0,301	1,461	0,374
12	0,488	2,177	11,51	0,540	2,972	0,645
18	0,652	2,504	16,70	0,744	4,520	0,866

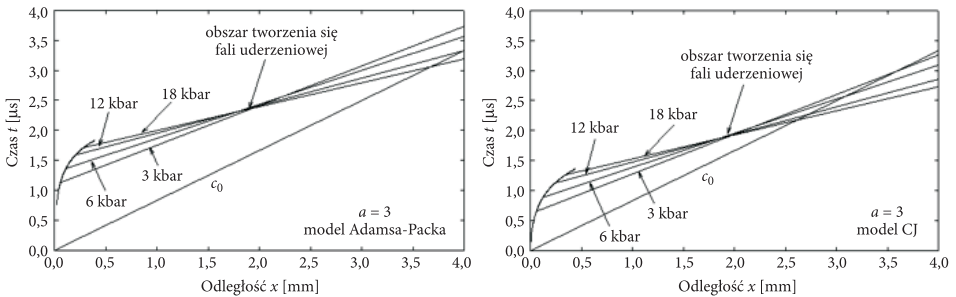
Na rysunkach 8-11 przedstawiono na płaszczyźnie  $x-t$  obraz falowy procesu przejścia palenia w detonację dla różnych wartości wykładnika  $a$  z równania (1). Zwraca uwagę niewielka różnica w odległościach od dna rury punktów tworzenia się fali uderzeniowej przy zastosowaniu obu modeli. Droga przejścia palenia w detonację w badanym porowatym materiale wybuchowym maleje od ok. 6 do



Rys. 8. Charakterystyki fali sprężania generowanej w wyniku spalania inicjującego materiału wybuchowego zamkniętego w rurze dla wykładnika  $a = 1$

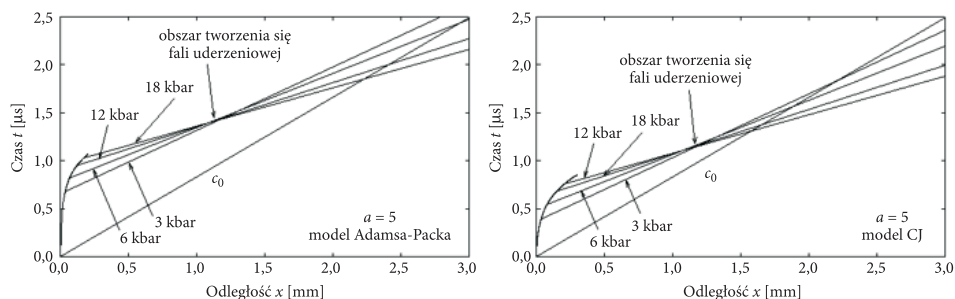


Rys. 9. Charakterystyki fali sprężania generowanej w wyniku spalania inicjującego materiału wybuchowego zamkniętego w rurze dla wykładnika  $a = 2$



Rys. 10. Charakterystyki fali sprężania generowanej w wyniku spalania inicjującego materiału wybuchowego zamkniętego w rurze dla wykładnika  $a = 3$

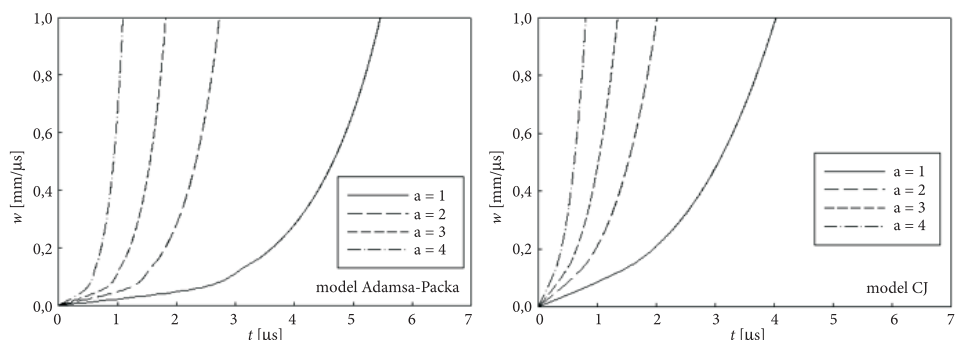




Rys. 11. Charakterystyki fali sprężania generowanej w wyniku spalania inicjującego materiału wybuchowego zamkniętego w rurze dla wykładnika  $a = 5$

1 mm przy zmianie parametru  $a$  od 1 do 5, czyli ze znacznym wzrostem szybkości narastania ciśnienia w produktach reakcji (rys. 7). Ten zakres zmian odległości przecięcia się charakterystyk odpowiada drodze rozwoju detonacji w inicjujących materiałach wybuchowych. Na przykład przejście palenia w detonację w porowatym azydku ołowiu ma miejsce na dystansie 1-3 mm w zależności od czasu trwania impulsu ciśnienia obciążającego (0,1 i 3,5  $\mu\text{s}$ ) o amplitudzie od 6-9 kbar [10]. Z kolei badany w Zakładzie Materiałów Wybuchowych kompleksowy materiał inicjujący  $[\text{Cu}(\text{C}_2\text{H}_4\text{N}_4)_3](\text{ClO}_4)_2$  pobudza do detonacji pentryt, jeśli długość ładunku materiału inicjującego wynosi co najmniej 4,5 mm, co oznacza, że na tym dystansie palenie musi przechodzić w detonację [9].

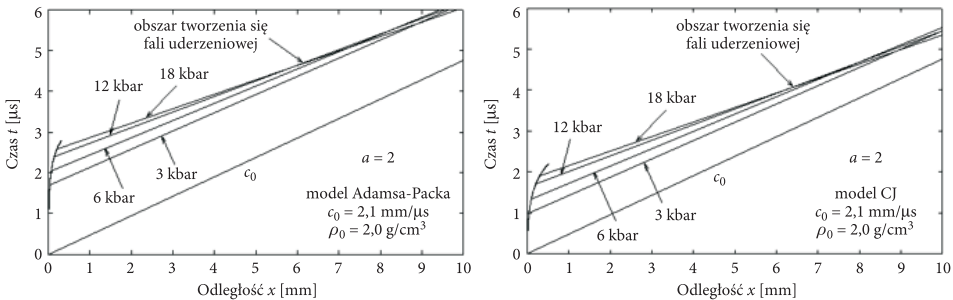
Porównano, jak zmienia się w czasie prędkość frontu deflagracji dla modelu Adamsa-Packa i modelu CJ. Wyniki obliczeń pokazano na rysunku 12. W modelu Adamsa-Packa prędkość frontu jest mniejsza w porównaniu z modelem CJ. Należy jednak pamiętać, że w tym pierwszym przypadku prędkość masowa za frontem fali wynosi zero (rys. 4c) i cała wydzielona energia reakcji przekazywana jest do



Rys. 12. zmiana w czasie prędkości fali płomienia w inicjującym materiale wybuchowym dla różnych wartości wykładnika  $a$

materiału wybuchowego. Wygenerowanie fali sprężania o danym ciśnieniu przed frontem fali wymaga więc mniejszej prędkości płomienia niż w przypadku modelu CJ, gdzie część energii spalania zużywana jest na nadanie produktom gazowym ujemnego pędu (rys. 4b).

Z analizy położenia punktu przecięcia się charakterystyk na rysunkach 8-11 wynika, że odległość tego punktu od brzegu ładunku zmienia się w stosunkowo małych granicach przy dużej zmianie szybkości narastania ciśnienia. W celu sprawdzenia, w jaki sposób na położenie tego punktu wpływają charakterystyki inicjującego materiału wybuchowego, gęstość i prędkość dźwięku, wykonano obliczenia dla materiału o większej gęstości. Do obliczeń przyjęto materiał inicjujący w postaci kryształu o gęstości  $\rho_0 = 2,0 \text{ g/cm}^3$  [9] i prędkości dźwięku  $c_0 = 2,1 \text{ mm}/\mu\text{s}$  (podobnie jak w kryształach azydki ołowiu). Parametry procesu palenia były identyczne z parametrami badanego wcześniej porowatego materiału inicjującego. Na rysunku 13 przedstawiono obrazy falowe procesu sprężania materiału wybuchowego przyspieszającą falą deflagracji dla obu zastosowanych modeli. Przyjęto zależność ciśnienia za frontem odpowiadającą parametrowi  $a = 2$  (rys. 7). Z porównania położenia punktów przecięcia się charakterystyk na rysunkach 9 i 13 wynika, że droga przejścia palenia w materiale krystalicznym o dużej gęstości jest ponad dwukrotnie większa niż w przypadku materiału porowatego.



Rys. 13. Charakterystyki fali sprężania generowanej w wyniku spalania inicjującego materiału wybuchowego o dużej gęstości

## 5. Podsumowanie

Zastosowanie modelu przyspieszania deflagracji w odlewanych materiałach wybuchowych do opisu procesu przejścia palenia w detonację w prasowanych, inicjujących materiałach pozwoliło uzyskać wyniki zgodne z danymi eksperymentalnymi co do rzędu wielkości. Fakt ten umożliwia oszacowanie prędkości frontu fali płomienia prowadzącej do pobudzenia materiału inicjującego do detonacji. Jednakże na dokładniejszą ocenę prędkości frontu i drogi przejścia palenia w detonację pozwolą dopiero eksperymentalne pomiary zależności ciśnienia w produktach reakcji

od czasu za frontem fali deflagracji. W przypadku materiałów porowatych bardziej precyzyjne prognozowanie parametrów PPD wymaga zastosowania złożonych modeli teoretycznych, lepiej przybliżających zjawiska towarzyszące przyspieszeniu deflagracji w tych materiałach. To z kolei prowadzi do konieczności rozwiązywania problemu PPD za pomocą metod numerycznych wykorzystywanych w dynamice płynów, na przykład metody schematów różnicowych.

Praca naukowa finansowana ze środków na naukę w latach 2008-2010 jako projekt badawczo-rozwojowy nr O R00001106.

Artykuł wpłynął do redakcji 29.09.2009 r. Zweryfikowaną wersję po recenzji otrzymano w styczniu 2010 r.

#### LITERATURA

- [1] C. M. TARVER, T. C. GOODALE, R. SHAW, M. COWPERTHWAITTE, *Deflagration-to-detonation transition studies for two potential isomeric cast primary explosives*, Sixth Symposium (International) on Detonation, Office of Naval Research, White Oak, 1976, 231.
- [2] A. MACEK, *Transition from deflagration to detonation in cast explosives*, Journal of Chemical Physics, 11, 1, 1959, 162-167.
- [3] A. E. FOGELZANG, V. P. SINDITSKI, V. Y. EGORSHEV, V. V. SERUSHKIN, *Effect of structure of energetic materials on burning rate*, Proceedings of Symposium on Decomposition, Combustion, and Detonation Chemistry of Energetic Materials, Boston, Materials Research Society, 418, 1995, 151.
- [4] G. K. ADAMS, D. C. BOSTON, PACK, *Some observations on the problem of transition between deflagration and detonation*, Seventh Symposium (International) on Combustion, Butterworths, London, 1959, 812.
- [5] YA. K. TROSHIN, *The generalized Hugoniot adiabetic curve*, Seventh Symposium (International) on Combustion, Butterworths, London, 1959, 789.
- [6] D. PRICE, J. F. WEHNER, *The transition from burning to detonation in cast explosives*, Combustion and Flame, 9, 1972, 419.
- [7] R. W. GIBSON, A. MACEK, *Flame fronts and compression waves during transition from deflagration to detonation in solids*, Eighth Symposium (International) on Combustion, Williams and Wilkins, Baltimore, 1962, 847.
- [8] M. M. CHAUDHRI, J. E. FIELD, *Deflagration in single crystals of lead azide*, Fifth Symposium (International) on Detonation, Office of Naval Research, Pasadena, 1970, 301.
- [9] S. CUDZIŁO, *Związki kompleksowe wykazujące zdolności wybuchowe*, Komunikat prywatny, 2009.
- [10] M. FRIDRICH, J. C. GALVEZ-RUIZ, T. M. KŁAPOTKE, P. MAYER, B. WEBER, J. J. WEIGAND, *BTA copper complexes*, Inorganic Chemistry, 44, 2005, 8044-8052.
- [11] F. W. DAVIES, A. B. ZIMMERSCHIED, F. G. BORGARDT, L. AVRAMI, *The Hugoniot and shock initiation threshold of lead azide*, Sixth Symposium (International) on Detonation, Office of Naval Research, White Oak, 1976, 389.

W. A. TRZCIŃSKI

**Modelling of a process of deflagration-to-detonation transition  
in condensed explosives**

**Abstract.** Theoretical models proposed in literature for deflagration-to-detonation transition in cast explosives are presented. One-dimensional deflagration models satisfying either the Chapman Jouguet conditions or the conditions of zero particles velocity behind the deflagration wave are described and physical phenomena accompanying the process of acceleration of the deflagration wave in solid explosives are discussed. Results of calculation for cast high explosives are quoted. The model of acceleration of the deflagration is applied for estimation of times and distances at which the deflagration waves lead to the formation of shock waves in primary explosives. The influence of combustion rate and physical properties of an explosive on a distance to detonation is analyzed.

**Keywords:** explosives, deflagration, deflagration-to-detonation transition modeling

**Universal Decimal Classification:** 662.1/4