На правах рукописи

Иванова Оксана Владимировна

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗРЫВНОГО И УДАРНО-ВОЛНОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА РЕАГИРУЮЩИЕ ПОРИСТЫЕ СМЕСИ НА ОСНОВЕ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ МОДЕЛИ СРЕДЫ

01.02.04 – механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Томск - 2009

Работа выполнена в очной аспирантуре ГОУ ВПО «Томский государственный университет» на кафедре механики деформируемого твердого тела и в отделе структурной макрокинетики Томского научного центра СО РАН

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Зелепугин Сергей Алексевич
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Герасимов Александр Владимирович
	доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Черепанов Олег Иванович
Ведущая организация:	Учреждение Российской академии наук Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва

Защита состоится «25» сентября 2009 года в «14^{30}» на заседании диссертационного совета Д 212.267.13 при Томском государственном университете по адресу: 634050, Томск, пр. Ленина, 36, ауд. 239 НИИПММ.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Томского государственного университета.

Автореферат разослан «20» августа 2009 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор технических наук Ю.Ф. Христенко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы диссертации. За последние годы существенно возрос интерес к изучению быстропротекающих процессов в реагирующих пористых средах и происходящих в них физико-химических превращений. Это обусловлено необходимостью снижения затрат при производстве космической и авиационной техники, в энергетике, химии, горнодобывающей промышленности, современном машиностроении, вызванное возможностью использовать заряд взрывчатого вещества (ВВ), представляющий собой небольшой, легкий и дешевый источник энергии высокой плотности и большой мощности, который способен выполнить полезную работу, и к тому же, при умелом обращении, безопасен. В связи с этим, актуальную роль приобретают методы математического моделирования таких быстропротекающих процессов, что, в свою очередь, требует разработки адекватных алгоритмов для их теоретического описания. В совокупности с доступными экспериментальными данными, такой подход обеспечивает возможность получения наиболее полной информации о поведении реагирующих сред, включая физико-химические превращения и пути формирования новых состояний веществ на основе разработки разнообразных численных моделей.

Перспективы связаны с получением метастабильных соединений в неравновесных условиях, для управляемого создания которых взрывное и ударно - волновое нагружение предоставляет большие возможности. Высокие давления и скорости вещества создают экстремальные условия для получения материалов с уникальными свойствами. При этом детальное описание внутрифазных и межфазных взаимодействий в многокомпонентных средах довольно сложное и чрезвычайно важное для оценки параметров среды в зависимости от макроскопической структуры среды и свойств ее компонентов. При моделировании таких сред следует учитывать многокомпонентность и сжимаемость смесей, переменность параметров процесса и наличие химических реакций. Эти дополнительные эффекты не позволяют, в общем случае, использовать результаты, полученные в рамках описания многокомпонентной среды как гомогенной, где смесь описывается уравнением однофазной среды, и определяются соответствующие средние свойства, которые не обязательно соответствуют свойствам отдельной фазы.

На сегодняшний день экспериментальное определение состава и параметров сложных химических систем при таких давлениях и температурах сопряжено со значительными трудностями. Влияние динамического воздействия на протекание твердофазных реакций еще не достаточно исследовано и, к сожалению, еще не достигло уровня технологии из-за недостатка экспериментальных данных, а также и численных методик, корректно описывающих данный процесс.

Таким образом, актуальность исследований взрывного и ударно-волнового нагружения реагирующих пористых смесей обусловлена потребностью в прогнозировании поведения реагирующих компонентов, с соответствующим учетом свойств каждого компонента в смеси и его вклада в процесс, при таких интенсивностях динамического воздействия, которые пока недоступны для прямого исследования экспериментальными методами.

Целью диссертационной работы является развитие многокомпонентной математической модели для прогнозирования поведения как инертных (процесс динамического компактирования), так и реагирующих пористых смесей (процесс ударно-волнового синтеза) при взрывном и ударно-волновом воздействии и выявление оптимальных параметров процесса динамического нагружения.

Задачи, решаемые для достижения цели.

1. Развитие многокомпонентной математической модели для прогнозирования поведения инертных и реагирующих пористых смесей при взрывном и ударно-волновом воздействии.
2. Выбор условия совместного деформирования компонентов смеси при взрывном и ударно-волновом нагружении.
3. Численное моделирование динамического взаимодействия стального ударника, метаемого скользящей детонацией ВВ, с цилиндрической ампулой, содержащей инертную пористую смесь алюминий (Al) - сера (S) на основе многокомпонентной модели среды.
4. Численное моделирование динамического взаимодействия стального ударника, метаемого скользящей детонацией ВВ, с цилиндрической ампулой, содержащей реагирующую пористую смесь алюминий - сера на основе многокомпонентной модели среды.
5. Определение оптимальных параметров ударно-волнового нагружения для уплотняемых материалов с целью обеспечения максимальной плотности конечных продуктов для выбранных условий нагружения.
6. Численное моделирование взрывного нагружения цилиндрической ампулы, содержащей инертные и реагирующие пористые смеси.

Научная новизна работы.

1. Развита многокомпонентная математическая модель среды и впервые применена для численного моделирования взрывного и ударно-волнового воздействия на инертные и твердофазно реагирующие пористые смеси.
2. Создана численная методика исследования поведения инертных и твердофазно реагирующих пористых смесей с применением условия совместного деформирования компонентов смеси.

3. Численно в осесимметричной постановке на основе многокомпонентной модели среды исследованы особенности процесса динамического компактирования пористой смеси алюминий-сера, взрывного и ударно-волнового синтеза сульфида алюминия, выявлено влияние скорости ударника, давлений, температур и толщины боковых стенок ампулы на плотности конечных продуктов.
4. Определены оптимальные параметры ударно-волнового нагружения для уплотняемых материалов с целью обеспечения максимальной плотности конечных продуктов для исследованных условий нагружения.

Практическая значимость работы.

Полученные теоретические представления о физике и механике процессов ударно-волнового нагружения как инертных, так и реагирующих многокомпонентных пористых смесей необходимы для обработки экспериментальных данных и развития теорий, представленных более широким классом пористых многокомпонентных твердофазных сред, а также для исследования закономерностей такого быстропротекающего процесса. На основе примененной численной модели многокомпонентной среды можно исследовать и прогнозировать поведение материалов, получение материалов с заранее заданными свойствами и характеристиками, а также осуществлять непрерывный контроль за изменением параметров исследуемой системы в ходе процесса динамического нагружения. Полученные результаты внедрены и используются в Томском государственном университете, отделе структурной макрокинетики ТНЦ СО РАН, Кыргызско-Российском славянском университете (г. Бишкек, Кыргызская Республика). Работа получила поддержку Министерства образования и науки РФ в рамках грантов для научно-исследовательской работы аспирантов государственных образовательных учреждений высшего профессионального образования (2004 г., проект А04-2.10-386), Президиума РАН (2004 – 2005 гг., проект 18.7 в рамках комплексной Программы фундаментальных исследований по направлению «Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий»), РФФИ - Администрация Томской области (2005 – 2007 гг., проект 05-03-98001), госбюджетной программы СО РАН по разделам «Химические науки» (2007 – 2011 гг., проект № 5.1.4.7.) в рамках Программы «Изучение быстропротекающих химических процессов в гетерогенных системах, образующих конденсированные продукты реакции, в условиях физического воздействия», № гос. регистрации 01.2.007 01450, Минобрнауки РФ в рамках АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» (2009-2010 гг., проекты 2.1.1/5993, 2.1.2/2509).

Достоверность полученных результатов обеспечивается физической и математической корректностью постановок задач, апробированностью выбранного метода их решения, контролем в процессе численного счета вы-

полнения законов сохранения, сравнением с экспериментальными результатами, полученными другими авторами.

Личный вклад автора состоит в развитии многокомпонентной математической модели для прогнозирования поведения инертных и реагирующих пористых смесей при взрывном и ударно-волновом воздействии; физико-математической постановке всех задач, решенных в диссертации; проведении численных расчетов и анализе полученных результатов, написании статей.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Многокомпонентная модель среды с выбранным и адаптированным условием совместного деформирования компонентов смеси для численного описания поведения инертных и реагирующих пористых смесей при взрывном и ударно-волновом нагружении.
2. Комплекс результатов численного моделирования динамического компактирования инертных пористых смесей на основе многокомпонентной модели среды.
3. Комплекс результатов численного моделирования ударно-волнового синтеза сульфида алюминия на основе многокомпонентной модели среды.
4. Комплекс результатов численного моделирования взрывного нагружения цилиндрической ампулы, содержащей инертные и реагирующие пористые смеси.

Апробация работы. Основные результаты и положения диссертации докладывались на Международной конференции «Забабахинские научные чтения» (Снежинск 2005); Международной конференции «Лаврентьевские чтения по математике, механике и физике» (Новосибирск 2005); III Международном симпозиуме «Горение и плазмохимия» (Алматы 2005); 14th APS Topical conference on shock compression of condensed matter (Baltimore, USA 2005); Международной школе-конференции молодых ученых (Томск 2005); 3-й Всероссийской конференции молодых ученых «Фундаментальные проблемы новых технологий в 3-м тысячелетии» (Томск 2006); II Всероссийской конференции молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических систем» (Томск 2006); IX International Symposium on Self-propagating High-temperature Synthesis (Dijon, France 2007); III Всероссийской конференции молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических систем» (Томск 2007); Международной конференции «Сопряженные задачи механики реагирующих сред, информатики и экологии» (Томск 2007); Всеросс. конф., посвященной 50-летию Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН «Проблемы механики сплошных сред и физики взрыва» (Новосибирск 2007); IV Всероссийской конференции молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических

систем» (Томск 2008); 7th Bienniale International Conference «New models and Hydrocodes for Shock Wave Processes in Condensed Matter» (Estoril, Portugal 2008); Всероссийской конференции по математике и механике (Томск 2008); II Международном семинаре «Гидродинамика высоких плотностей энергии» (Новосибирск 2008).

Публикации. Основные результаты исследований опубликованы в 19 статьях, из них 5 работ в журналах (2 статьи в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК), 14 – в научных сборниках, материалах Всероссийских и Международных конференций.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти разделов, основных выводов, списка литературы и приложения. Общий объем диссертации 138 страниц, включая 47 рисунков, 2 таблицы, 2 приложения, 155 наименований в библиографическом списке.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, формулируется цель работы, научная новизна полученных результатов, положения, выносимые на защиту.

В первом разделе проведен аналитический обзор существующих методов получения и обработки материалов в условиях ударно-волнового и взрывного нагружения. Обоснована необходимость исследования направления взрывной обработки - ударно-волнового воздействия на вещества и их смеси, способные к химическим и фазовым превращениям на основе многокомпонентной модели среды, с соответствующим учетом свойств каждого компонента смеси. Рассмотрена возможность протекания твердофазных химических реакций в детонационном режиме. Проведен анализ особенностей протекания экзотермических реакций при взаимодействии серы с металлами.

Во втором разделе диссертации представлена система уравнений для описания сжимаемых упругопластических многокомпонентных сред и происходящих в них физико-химических превращений с учетом соответствующего обмена массой, импульсом и энергией между компонентами, а также зарождения и эволюции микроповреждений, которая состоит из уравнений неразрывности, движения, энергии, скорости изменения удельного объема микроповреждений:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i\rho_i) + \nabla\alpha_i\rho_i v_i = \sum_{j=1}^{N} J_{ji},\ (i, j = 1, 2, \ldots, N), \tag{1}$$

$$\alpha_i\rho_i \frac{d_i v_i}{dt} = \nabla\sigma_i + \alpha_i \sum_{j=1}^{N} \alpha_j R_{ji},\ (i, j = 1, 2, \ldots, N), \tag{2}$$

$$\alpha_i \rho_i \frac{d_i E_i}{dt} = \sigma_i \varepsilon_i + \alpha_i \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \Phi_{ji}, \ (i, j = 1, 2, \ldots, N), \qquad (3)$$

$$\frac{dV_{f_i}}{dt} = \begin{cases} 0, \ \text{если} \ |P_{s_i}| \le P_i^* \ \text{или} \ (P_{s_i} > P_i^* \ \text{и} V_{f_i} = 0) \\ -\operatorname{sign}(P_{s_i}) K_{f_i} (|P_{s_i}| - P_i^*)(V_{2_i} + V_{f_i}), \\ \text{если} \ P_{s_i} < -P_i^* \ \text{или} \ \ (P_{s_i} > P_i^* \ \text{и} \ V_{f_i} > 0), \end{cases} \qquad (4)$$

где t – время, ρ_i - истинная плотность i-го компонента, равная массе i-го компонента в единице объема i-го компонента, v_i - вектор скорости, E_i - удельная внутренняя энергия, $\varepsilon_{i_{ji}}$ - тензор скоростей деформаций, $\sigma_{i_{ji}} = -\alpha_i P_i \delta_{i_{ji}} + S_{i_{ji}}$ - компоненты тензора напряжений, P_i - давление, $S_{i_{ji}}$ - компоненты девиатора напряжений, R_{ji} - интенсивность обмена импульсом между j-м и i-м компонентами, Φ_{ji} - интенсивность обмена энергией между j-м и i-м компонентами, J_{ji} - интенсивность перехода массы из j-го в i-й компонент, N – число компонентов. где P_{s_i} - давление в сплошном компоненте смеси, $P_i^* = P_{k_i} V_{1_i} / (V_{f_i} + V_{1_i})$; $V_{1_i}, V_{2_i}, P_{k_i}, K_{f_i}$ - экспериментально определяемые константы материала компонентов.

В многокомпонентной смеси каждый компонент занимает лишь часть объема смеси, в связи с этим, для определения доли объема смеси, занимаемые каждым компонентом используется величина α_i:

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \ldots + \alpha_N = 1, \ (\alpha_i \ge 0), \ \alpha_i = \rho_i^* / \rho_i,$$

где ρ_i^* - приведенная плотность (масса i-го компонента в единице объема среды). Для определения массовых долей смеси, занимаемые каждым компонентом используется величина β_i:

$$\beta_1 + \beta_2 + \ldots + \beta_N = 1, \ (\beta_i \ge 0), \ \beta_i = m_i / m,$$

где m_i- масса i-го компонента, m - масса смеси.

Химическая реакция синтеза в прессованной пористой многокомпонентной смеси описывается с помощью феноменологической модели необратимых химических превращений, основанной на кинетике нулевого порядка:

$$J_{ji} = \frac{d\eta}{dt} = \begin{cases} 0, & \text{если} \ \eta = 1 \ \text{или} \ (T_i < T_{\eta_i} \ \text{и} \ P < P_\eta) \\ f(P_\eta), & \text{если} \ \eta < 1 \ \text{и} \ (T_i \ge T_{\eta_i} \ \text{или} \ P \ge P_\eta) \end{cases}$$

$$f(P_\eta) = \begin{cases} K_0, & \text{если} \ P < P_\eta \\ K_p K_0, & \text{если} \ P \ge P_\eta, \end{cases} \qquad (5)$$

$$J_{ji} = -J_{ij}, \ J_{ii} = 0,$$

где T_i – температура, P – согласованное давление компонентов, T_{η_i}, P_η, K_p, K_0 - константы, η - степень превращения вещества.

Используемые для моделирования химической реакции в условиях ударно-волнового нагружения кинетические соотношения (5) характеризуются постоянной скоростью протекания химических превращений. Химическая реакция в данных условиях является вынужденной, инициируется и протекает при выполнении критерия по давлению или по температуре. Если оба критических условия перестают выполняться, то реакция останавливается.

В уравнении движения (2) R_{ji} представляет интенсивность обмена импульсом между j-м и i-м компонентами и может быть представлена:

$$R_{ji} = a_{ji}(v_j - v_i) + J_{ji} v_{ji}\,,\ (i = 1, 2, \ldots, N;\ i \neq j),\ R_{ji} = -R_{ij},$$

$$R_{ii} = 0,\ \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j R_{ji} = 0.$$

Здесь v_{ji} характеризует скорость или импульс массы, претерпевающей превращение $j \to i$ и находящейся в i-м компоненте.

В уравнении энергии (3) Φ_{ji} представляет интенсивность обмена энергией между j-м и i-м компонентами и может быть представлена:

$$\Phi_{ji} = \varphi_{ji}(P_j - P_i) + \psi_{ji}(T_j - T_i) + J_{ji} E_{ji}\,,\ (i = 1, 2, \ldots, N;\ i \neq j),\ \Phi_{ji} = -\Phi_{ij},$$

$$\Phi_{ii} = 0,\ \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j \Phi_{ji} = 0\,,$$

где E_{ji} - энергия массы, претерпевающей переход $j \to i$ и находящейся в i-м компоненте.

Функции a_{ji}, φ_{ji} и ψ_{ji} имеют конкретный вид, зависящий от агрегатных и фазовых состояний i-го и j-го компонентов, размеров, формы и шероховатости поверхности частиц, механических и тепловых свойств компонентов.

Давление в неповрежденном компоненте смеси является функцией удельного объема, удельной внутренней энергии и во всем диапазоне условий нагружения определяется с помощью уравнения состояния типа Ми-Грюнайзена:

$$P_i = \rho_{0_i} u_{c_i}{}^2 \mu_i + \rho_{0_i} u_{c_i}{}^2 [1 - \gamma_{0_i}/2 + 2(b_i - 1)]\mu_i{}^2 + \rho_{0_i} u_{c_i}{}^2 [2(1 - \gamma_{0_i}/2)(b_i - 1) + 3(b_i - 1)^2]\mu_i{}^3 + \gamma_{0_i} \rho_{0_i} E_i\,,$$

где $\mu_i = V_{0_i}/(V_i - V_{f_i}) - 1$, γ_{0_i} - коэффициент Грюнайзена, V_{i_0} и V_i - начальный и текущий удельные объемы компонентов, u_{c_i} и b_i - константы ударной адиабаты Гюгонио.

В качестве условия совместного поведения (деформирования) компонентов смеси было выбрано и адаптировано условие равенства давлений:

$$P = P_1(V_1,E_1) = P_2(V_2,E_2) = \ldots = P_N(V_N,E_N).$$

При расчете порообразования в условиях ударно-волнового нагружения предполагалось, что на изменение пористости влияет только шаровая компонента напряжений или давление, а компоненты девиатора напряжений ограничены независимой девиаторной функцией текучести:

$$2G_i\left(\varepsilon_{i_{ij}} - \frac{1}{3}\varepsilon_{i_{kk}}\delta_{i_{ij}}\right) = \frac{dS_{i_{ij}}^{0}}{dt} + \lambda_i S_{i_{ij}},$$

где $dS_{i_{ij}}^{0}/dt$ - производная по Яуманну, определяемая формулой:

$$\frac{dS_{i_{ij}}^{0}}{dt} = \frac{dS_{i_{ij}}}{dt} - S_{i\mathrm{k}}W_{i_{jk}} - S_{i_{jk}}W_{i_{ik}},$$

причем $2W_{i_{ij}} = \partial v_{i_i}/\partial x_j - \partial v_{j_i}/\partial x_i$. Параметр λ_i тождественно равен 0 при упругой деформации, а при наличии пластической - определяется с помощью условия текучести Мизеса:

$$S_{i_{ij}}S_{i_{ij}} = \frac{2}{3}\sigma_i^{\,2}.$$

В приведенных выше формулах G_i - модуль сдвига, σ_i - динамический предел текучести, которые определяются согласно соотношениям:

$$G_i = G_{0_i}K_{T_i}\left(1 + \frac{c_iP_i}{(1+\mu_i)^{1/3}}\right)\frac{V_{3_i}}{(\mathrm{V}_{f_i} + V_{3_i})},$$

$$\sigma_i = \begin{cases} \sigma_{0_i}K_{T_i}\left(1 + \dfrac{c_iP_i}{(1+\mu_i)^{1/3}}\right)\left(1 - \dfrac{V_{f_i}}{V_{4_i}}\right), \text{ если } V_{f_i} \le V_{4_i}, \\ 0, \text{ если } V_{f_i} > V_{4_i} \end{cases}$$

$$K_{T_i} = \begin{cases} 1, & \text{если } T_{0_i} \le T_i \le T_{1_i} \\ \dfrac{T_{m_i} - T_i}{T_{i_m} - T_{i_1}}, & \text{если } T_{1_i} < T_i < T_{m_i}. \\ 0, & \text{если } T_i \ge T_{m_i} \end{cases}$$

Здесь T_{m_i} - температура плавления вещества компонентов, c_i, V_{3_i}, V_{4_i}, T_{1_i} - константы материала компонентов. Выбор функции $K_{T_i}(T_i)$ осуществлялся с целью моделировать в расчетах атермический характер пластического деформирования и динамической прочности твердых тел при высоких скоростях деформирования (10^4 с$^{-1}$ и выше).

Для вычисления температуры использовались соотношения:

$$dT_i = \begin{cases} d(E_i - E_{0x_i})/c_{p_i}, & \text{если } T_i < T_{m_i} \\ 0, & \text{если } T_i = T_{m_i} \\ d(E_i - E_{0x_i} - \Delta H_{m_i})/c_{p_i}, & \text{если } T_i > T_{m_i} \end{cases},$$

где удельная теплоемкость c_{p_i} возрастает линейно с ростом температуры до температуры плавления вещества:

$$c_{p_i} = \begin{cases} c^0_{p_i} + \dfrac{c^L_{p_i} - c^0_{p_i}}{T_{m_i} - T_{i_0}}(T_i - T_{0_i}), & \text{если } T_{0_i} \le T_i < T_{m_i} \\ c^L_{p_i}, & \text{если } T_i \ge T_{m_i} \end{cases},$$

а холодная составляющая удельной внутренней энергии E_{0x_i} определяется выражением:

$$E_{0x_i} = \begin{cases} E_{0_i}, & \text{если } \xi_i < 0 \\ E_{0_i} + E_{1_i}\xi_i + E_{2_i}\xi_i^{\,2} + E_{3_i}\xi_i^{\,3} + E_{4_i}\xi_i^{\,4}, & \text{если } \xi_i \ge 0 \end{cases},$$

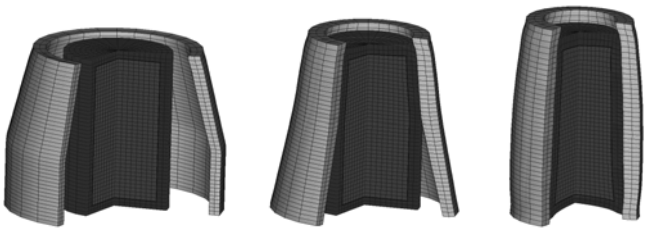
где $\xi_i = 1 - \rho_{0_i}/\rho_{s_i}$, ΔH_{m_i} - удельная теплота плавления, $c^0_{p_i}$ и $c^L_{p_i}$ - константы материала, $E_{0_i} = -T_{0_i}\, c^0_{p_i}$, $E_{1_i} = \gamma_{0_i} E_{0_i}$, $E_{2_i} = (a_i^{\,2} + \gamma_{0_i}^{\,2} E_{0_i})/2$, $E_{3_i} = (4b_i a_i^{\,2} + \gamma_{0_i}^{\,3} E_{0_i})/6$, $E_{4_i} = (-2\gamma_{0_i} b_i a_i^{\,2} + 18 a_i^{\,2} b_i^{\,2} + \gamma_{0_i}^{\,4} E_{0_i})/24$, T_{0_i} - начальная температура.

Для решения пространственных задач ударно-волнового нагружения реагирующих пористых многокомпонентных смесей используется метод конечных элементов, соотношения которого приведены в подразделе 2.6. На основе этого метода строится конечно-элементная модель дискретизации соударяющихся тел, включающая задание начальных координат и масс узловых точек от всех компонентов в элементе и определение функций формы. Все компоненты смеси одновременно заполняют один и тот же объем, занятый смесью. Задаваясь начальным, достаточно малым шагом по времени, рассчитываются скорости деформаций, девиаторные составляющие напряжений и полные напряжения каждого компонента смеси. Определяются эквивалентные узловые силы, обусловленные внутренними напряжениями компонентов смеси. Внутри элемента компоненты имеют соответствующие скорости центра масс, обусловленные разными упруго-пластическими свойствами компонентов. В качестве условия совместного деформирования компонентов в смеси и для определения объема, в действительности занимаемого компонентом, используется условие равенства давлений. После взаимодействия компонентов друг с другом и их суммирующего вклада в узловые силы элемента с учетом протекания химической реакции (ударно-

волновой синтез) или без учета химической реакции (динамическое компактирование) и объемной концентрации компонентов, они приобретают скорость и ускорение соответствующего элемента. Выбор величины следующего шага по времени из условий обеспечения устойчивости счета завершает расчетный цикл, который может быть повторен до достижения какого-либо из заданных критериев окончания счета. Скорости и перемещения узлов и, следовательно, новое положение взаимодействующих тел в дальнейшем определяются интегрированием уравнений движения с учетом суммирующего вклада компонентов в узловые силы и соответствующих граничных условий. Энергетическим источником взаимодействия служит кинетическая энергия ударника, метаемого скользящей детонацией ВВ и движущегося с заданной скоростью либо внутренняя энергия продуктов взрыва в случае процессов взрывного нагружения.

В третьем разделе представлены результаты численного моделирования ударно-волнового компактирования инертной пористой смеси алюминий-сера на основе многокомпонентной модели среды.

В осесимметричной постановке в рамках лагранжева подхода была рассмотрена задача динамического взаимодействия стального ударника, метаемого скользящей детонацией ВВ, с цилиндрической ампулой, содержащей инертную пористую смесь алюминий (Al) - сера (S). Состав смеси представлял собой 65 массовых долей серы и 35 массовых долей алюминия. Высота пористого цилиндрического образца 26 мм, диаметр 16 мм. Толщина боковой стенки ампулы Δh = 2 мм, торцевых стенок 2 мм. Внешний диаметр ударника 32 мм, толщина стенок ударника δ_0 = 4 мм. Начальная скорость ударника v_0 = 800 м/с.



7 мкс 17 мкс 27 мкс

Рис. 1. Стадии динамического компактирования.

Рис.1 демонстрирует расчетные конфигурации в различные моменты времени, характеризующие процесс компактирования.

Результаты показали неравновесность давлений и температур компонентов смеси. Рис. 2 и 3 иллюстрируют давления и температуры в центре прессуемых компонентов смеси без учета совместного деформирования компонентов в зависимости от времени.

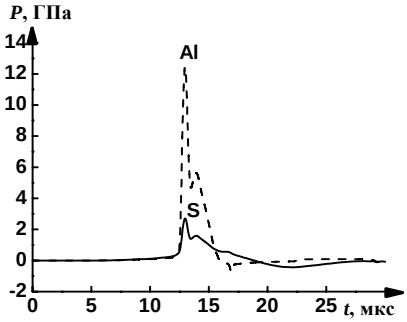


Рис. 2. Изменение давления во времени в центре ампулы.

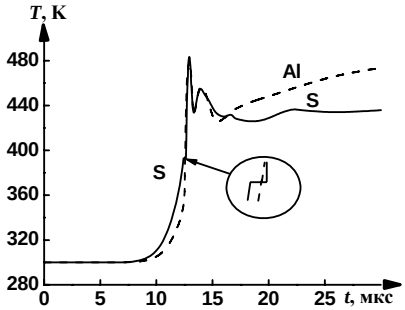


Рис. 3. Изменение температуры во времени в центре ампулы

После 12 мкс процесса наблюдалось одновременное существование двух фаз, обусловленное переходом серы в жидкое состояние после достижения температуры плавления, в то время как алюминий в течение всего процесса компактирования находился в твердой фазе, что невозможно выявить, используя модель однофазной среды с усредненными характеристиками материалов.

Рис. 4 иллюстрирует согласованное давление пористых компонентов смеси при совместном деформировании Al и S. На рис. 5 представлен график изменения удельного объема пор компонентов смеси в центре прессуемого образца с принятым условием равенства давлений в качестве условия совместного деформирования компонентов.

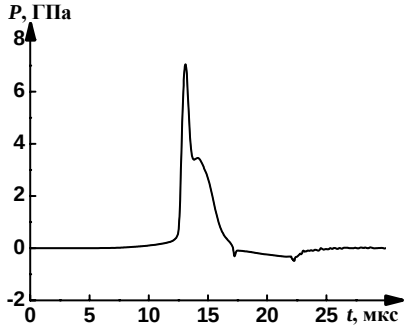


Рис. 4. Согласованное давление компонентов смеси в центре ампулы.

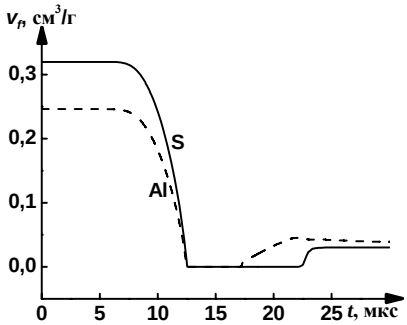
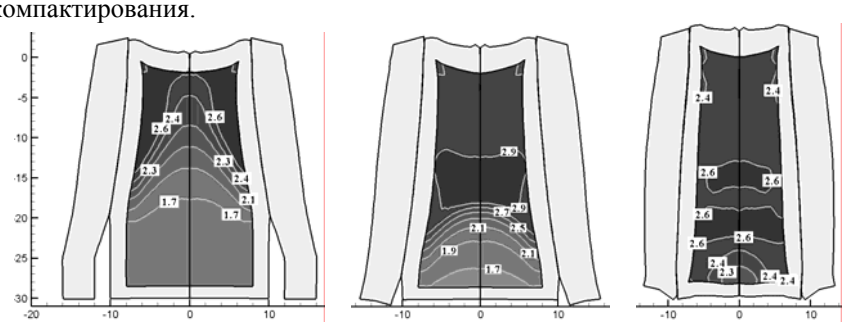


Рис. 5. Изменение пористости компонентов смеси в центре ампулы.

Результаты численного моделирования для пористой инертной смеси Al-S показывают, что процесс ударно - волнового нагружения цилиндрической ампулы можно разделить на несколько стадий. На первой стадии происхо-

дит компактирование при относительно низких давлениях, на второй стадии развиваются высокие давления, на третьей стадии происходит рост пор под действием растягивающих напряжений. В зависимости от свойств компактируемого материала, оптимальный режим компактирования должен состоять из первой или первой и второй стадий в общем случае трехстадийного процесса взрывного компактирования.

Рис. 6 демонстрирует распределение изолиний плотности (г/см^3) пористого Al, помещенного в цилиндрическую ампулу, в процессе динамического компактирования.



10 мкс 13 мкс 18 мкс

Рис. 6. Распределение изолиний плотности в Al в осевом сечении ампулы.

Из рис. 6 очевидно, что уплотнение начинается в боковых слоях образца, прилегающих к стенкам ампулы. В момент времени 13 мкс наблюдается однородное уплотнение большей части образца Al, наибольшее значение плотности Al - 2.9 г/см^3. К моменту процесса 18 мкс произошло уплотнение всего образца Al. Практически весь образец имеет однородную структуру с плотностью 2.6 г/см^3, за исключением нижней и верхней областей образца, прилегающих к боковым стенкам ампулы.

В подразделах 3.2 и 3.3 рассмотрено влияние скорости ударника и толщины боковой стенки ампулы на процесс ударно-волнового компактирования пористой инертной смеси алюминий-сера. Скорость ударника изменялась в пределах 600 - 1200 м/с. Толщина боковой стенки ампулы изменялась в пределах 2 - 4 мм. Анализ результатов показал, что увеличение скорости ударника приводит к увеличению давлений и температур, а увеличение толщины боковой стенки ампулы - к понижению давлений и температур в прессуемых компонентах смеси.

На рис. 7 представлены графики изменения истинных плотностей компонентов смеси при варьировании скоростей ударника.

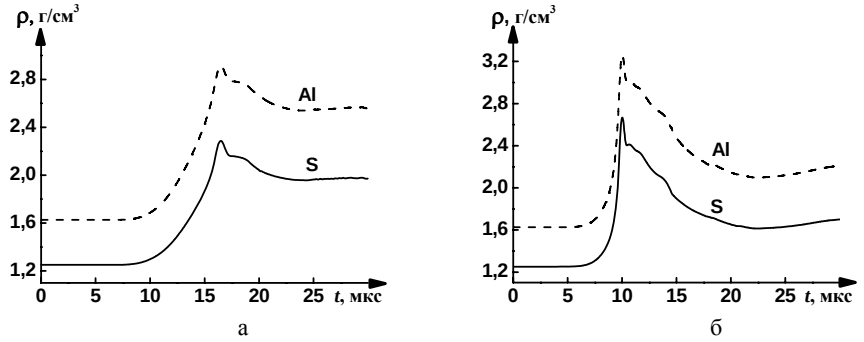


Рис. 7. Изменение плотности компонентов смеси (α_0=0.4) во времени в центре ампулы: (а) - v_0 = 800 м/с; (б) - v_0 = 1200 м/с.

Самое большое значение плотности у компонентов наблюдается при скорости ударника 1200 м/с (рис. 7б) к 10 мкс процесса. Но после завершения процесса ударно-волнового нагружения более высокие плотности наблюдаются у компонентов при скорости ударника 800 м/с (рис. 7а). Увеличение скоростей ударника, и, соответственно, давлений и температур, не приводит к увеличению плотностей конечных продуктов и может являться причиной для образования полостей в материалах.

На рис. 8 представлены графики изменения истинных плотностей компонентов смеси при варьировании толщины боковой стенки ампулы и начальном значении пористости компонентов.

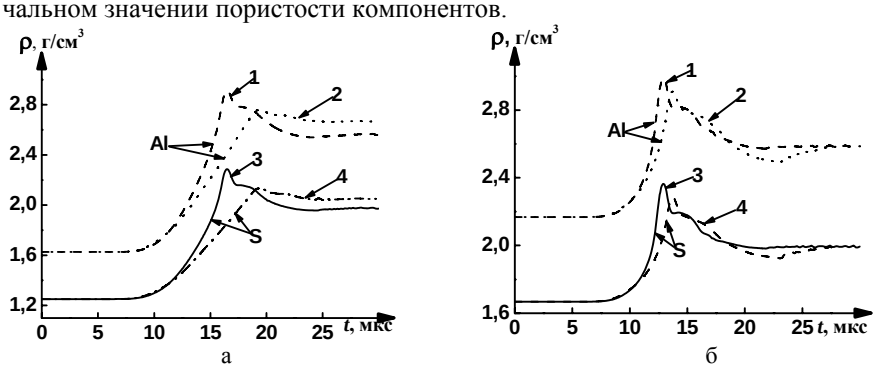


Рис. 8. Изменение плотности компонентов смеси во времени в центре ампулы для начальной скорости удара 600 м/с и пористости 0.4 - (а), 0.2 - (б).
Кривые 1, 3 соответствуют толщине боковой стенки ампулы Δh = 2 мм; 2, 4 - 4 мм.

Анализ результатов показывает, что для скорости ударника 600 м/с и пористости компонентов 0.4 (рис. 8а) при увеличении толщины боковой стен-

ки ампулы пиковые значения плотностей уменьшаются как у Al, так и у S. Но после завершения процесса ударно-волнового нагружения более высокие плотности наблюдаются у компонентов при большей толщине боковой стенки ампулы. Для скорости ударника 600 м/с (рис 8б) и пористости компонентов 0.2 увеличении толщины боковой стенки ампулы не влияет на конечные значения плотностей компонентов смеси.

В четвертом разделе представлены результаты численного моделирования ударно-волнового нагружения реагирующей пористой смеси алюминий-сера на основе многокомпонентной модели среды. Состав смеси представлял собой 65 массовых долей серы и 35 массовых долей алюминия, что при инициировании химической реакции соответствует стехиометрии образования сульфида алюминия (Al_2S_3). Постановка задачи ударно-волнового синтеза сульфида алюминия аналогична постановке задачи ударно-волнового компактирования инертной пористой смеси Al – S, приведенной в подразделе 3.1.

Сверхбыстрая химическая реакция в смеси Al-S происходит при превышении в компонентах смеси температурой или давлением критических значений T_η и p_η, равных 392.5 К и 2 ГПа. Химическая реакция начинается при выполнении критерия по температуре (данный критерий соответствует температуре плавления серы) и не прерывается вплоть до полного завершения синтеза сульфида алюминия. Скорость химических превращений K_0 = 4816 ГДж/(кг*с). Энтальпия химической реакции ΔH = 4816 кДж/кг.

На рис. 9 и 10 представлены графики изменений давлений для инертной и реагирующей смеси Al-S и температур для инертных компонентов смеси (Al, S) и Al_2S_3 в центре ампулы с пористостью - 0.4 и v_0 = 2000 м/с.

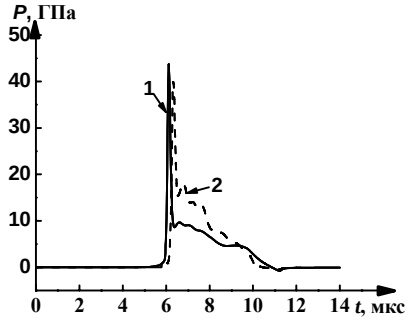


Рис. 9. Изменение давления во времени: кривая 1 – химически активная смесь; 2 – инертная смесь.

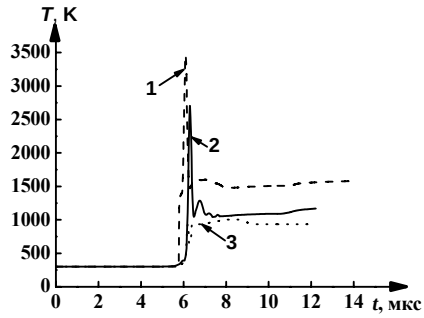


Рис. 10. Изменение температуры: кривая 1 – образующийся в результате реакции Al_2S_3; 2, 3 – инертные S и Al.

Пиковое давление реагирующих пористых компонентов смеси превышает пиковое давление инертных пористых компонентов смеси (рис. 9). Рис.

10 демонстрирует, что температура ударно сжатых реагирующих компонентов существенно превышает температуры инертных компонентов, что связано с вкладом химической реакции в процесс.

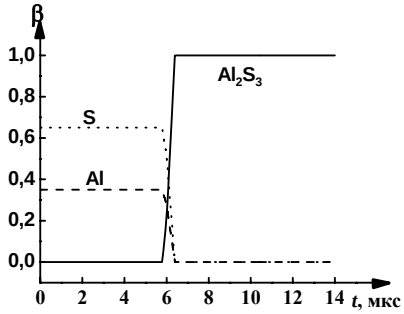
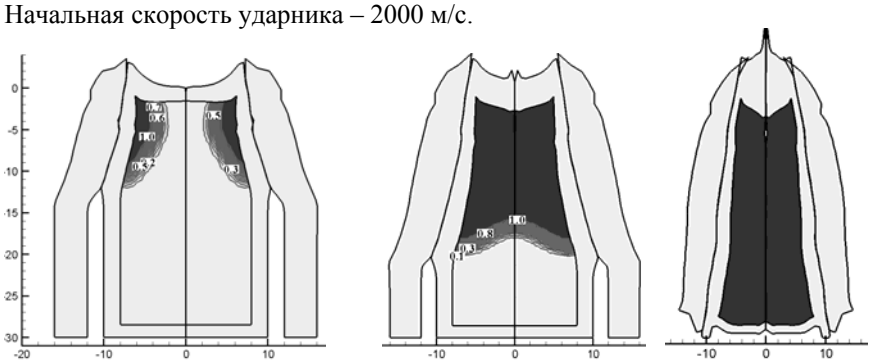


Рис. 11. Изменение массовых долей компонентов во времени.

На рис. 11 представлены графики изменения массовых долей пористых реагирующих компонентов смеси Al-S в центре нагружаемого образца, при начальном значении пористости 0.4 и v_0 = 2000 м/с. Анализ численных результатов показывает, что химические превращения между Al и S инициируются в проходящей ударной волне и завершаются образованием Al_2S_3 за времена ударно-волнового нагружения.

Рис. 12 демонстрирует изолинии степени превращения в результате реакции между пористыми компонентами Al и S в цилиндрической ампуле, в разные моменты времени, характеризуя процесс ударно-волнового синтеза. Начальная скорость ударника – 2000 м/с.



4 мкс 6 мкс 10 мкс

Рис. 12. Распределение изолиний степени превращения в осевом сечении ампулы.

На начальном этапе синтеза Al_2S_3 химическая реакция инициируется в боковых слоях смеси, так как фронтом ударной волны, прежде всего, спрессовываются слои смеси, прилегающие к боковым стенкам ампулы (рис. 12). К моменту времени 10 мкс химическая реакция протекла полностью во всем образце с образованием Al_2S_3, а в верхней части прореагировавшего образца в осевой области отчетливо видно образование небольшого полого канала. Рис. 12 иллюстрирует, что большие скорости ударника и скорости детонации могут привести к образованию полостей в материалах.

В подразделе 4.2 рассмотрено влияние скорости ударника на процесс ударно-волнового синтеза сульфида алюминия. Скорость ударника изменялась в пределах 1000 - 2000 м/с.

Анализ результатов показал, что увеличение скорости ударника приводит к более высоким давлениям в реагирующих компонентах, а также влияет на время начала химической реакции синтеза сульфида алюминия. Кроме того, увеличение скорости ударника приводит к повышению температуры в реагирующих компонентах смеси.

На рис. 13 и 14 представлены графики изменения массовых долей и истинных плотностей образующегося в результате химической реакции сульфида алюминия при варьировании скоростей ударника и начальном значении пористости компонентов 0.4.

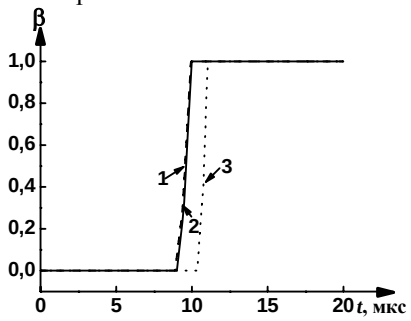


Рис. 13. Изменение массовых долей Al_2S_3 в центре ампулы.

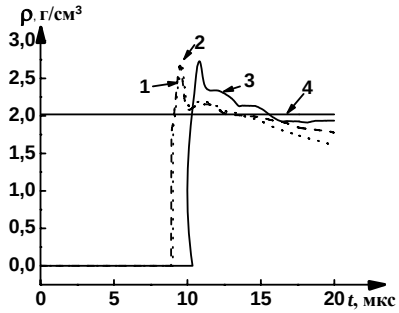


Рис. 14. Изменение истинных плотностей Al_2S_3 в центре ампулы.

Номера кривых на рис. 13 и 14 соответствуют следующим вариантам: 1 – скорость ударника v_0 = 2000 м/с; 2 - v_0 = 1800 м/с; 3 - v_0 = 1000 м/с; 4 – плотность монолитного Al_2S_3 (2.02 г/см^3). Начальная скорость соударения существенным образом влияет на время начала химической реакции синтеза в смеси (рис. 13). Реагирующие компоненты вступают в реакцию при превышении температурой критического значения $T_п$ = 392.5 К и завершаются образованием Al_2S_3 за времена ударно-волнового нагружения. Пиковые значения плотностей Al_2S_3 практически совпадают при разных исследуемых скоростях ударника (рис. 14). Но после протекания химической реакции и завершения процесса ударно-волнового синтеза, значение плотности, достаточно близкой к значению плотности Al_2S_3 в беспористом состоянии (линия 4 на рис. 14), наблюдаются у Al_2S_3 при меньшей скорости ударника v_0 = 1000 м/с (кривая 3). Увеличение скоростей ударника и, соответственно, давлений и температур при ударно-волновом нагружении реагирующих компонентов смеси может привести к получению конечных продуктов с достаточно низкой плотностью.

В пятом разделе представлены результаты численного моделирования процессов взрывного компактирования и синтеза в пористых смесях на основе многокомпонентной модели среды и проведены сравнения с экспериментами.

В подразделе 5.1 проведено экспериментально-теоретическое определение параметров взрывного нагружения цилиндрической ампулы и рассчитаны параметры процесса взрывного нагружения для дальнейшего их использования в численном моделировании.

В качестве нагружаемого материала бралась смесь алюминиевого порошка (размер частиц <100 мкм) и порошка серы (размер частиц 100÷300 мкм). Порошки перемешивались в массовой пропорции 35/65 (Al/S), после чего спрессовывались в восемь таблеток диаметром 14.2 мм, высотой 7.5 мм каждая, с пористостью 0.15 (15% пор от общего объема). Таблетки помещались в стальную цилиндрическую ампулу с внешним диаметром 20 мм. Нагружение смеси в ампуле производилось ударом стальной трубы с внешним диаметром 37 мм и толщиной стенки 3 мм, разогнанной продуктами детонации взрывчатого вещества (ВВ). В качестве ВВ бралась смесь аммонит 6ЖВ/аммиачная селитра в пропорции 1/1 с плотностью 1.07 г/см^3. Внешний диаметр заряда был 64 мм. Сборка помещалась в поле двух рентгеновских трубок «Орион 600», с помощью которых было произведено фотографирование процесса нагружения ампулы.

Схема эксперимента приведена на рис. 15. На рис. 16 приведены рентгеновские снимки экспериментальной сборки до и в процессе взрывного нагружения.

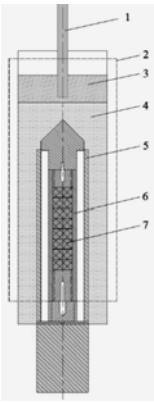
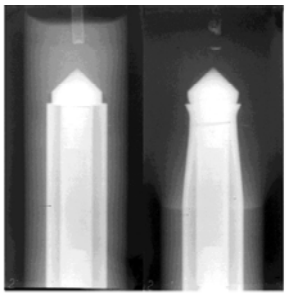


Рис. 15. Схема экспериментальной сборки:
1 - детонатор; 2 - поле рентгеновской съемки; 3 - заряд аммонита 6ЖВ; 4 - заряд из смеси аммонита 6ЖВ и аммиачной селитры 1/1; 5 - метаемая труба; 6 - ампула; 7 - нагружаемая смесь Al-S.



а б

Рис. 16. Рентгеновские снимки экспериментальной сборки до (а) и в процессе (б) взрывного нагружения.

После анализа рентгеновских снимков было установлено, что скорость детонации смесевого ВВ составила 3.3 км/с; угол поворота метаемой трубы - 4.7^0; расчетное давление Чепмена-Жуге 3.3÷3.6 ГПа. Расстояние, пройден-

ное детонационной волной со скоростью 3.3 км/с, от верхнего торца ударника (без учета конической крышки ампулы) к 19 мкс процесса составило 63.6 мм.

Для определения параметров взрывного нагружения численно в осесимметричной постановке была рассмотрена задача взрывного нагружения стального цилиндрического ударника, метаемого скользящей детонацией ВВ, с цилиндрической ампулой, содержащей пористую смесь алюминий - сера с такими же массовыми долями, как в эксперименте (рис. 17).

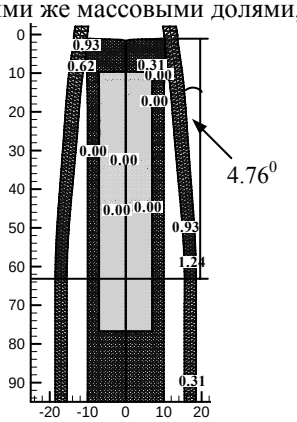


Рис. 17. Конфигурации тел при взрывном нагружении в момент времени 19 мкс.

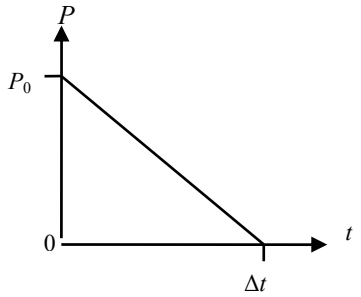


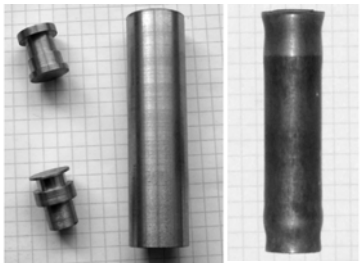
Рис. 18. Изменение давления продуктов взрыва во времени.

Предполагается, что процесс детонации стационарен, давление продуктов взрыва изменяется (падает) во времени прямолинейно, что графически представлено на рис. 18. Тогда окончательный вид уравнений для вычисления давления продуктов взрыва на боковую стенку ударника принимает вид: $P = P_0 - \frac{P_0}{\Delta t} t$ при $0 \le t \le \Delta t$, $P = 0$ при $t > \Delta t$, $\Delta t = \frac{\Delta}{c}$, $c = \frac{D}{2}$, где Δ – толщина ВВ, c – скорость волны разгрузки, D – скорость детонации.

Анализ результатов расчетов показал, что при P_0 = 4 ГПа численное моделирование процесса взрывного нагружения количественно и качественно соответствует эксперименту. К моменту времени 19 мкс процесса взрывного нагружения, расстояние, пройденное детонационной волной со скоростью 3.3 км/с составило 63 мм, угол поворота метаемого ударника - 4.76^0. (рис. 17). Полученные численные результаты количественно согласуются с результатами, полученными в эксперименте (рис. 16б), а динамика воздействия продуктов взрыва на ударник в эксперименте качественно и количественно соответствует численному моделированию действия продуктов взрыва на цилиндрические ударник и ампулу со смесью Al-S.

В подразделе 5.2 представлены экспериментальные и численные результаты по взрывному компактированию пористой смеси алюминий-сера-графит. Смесь алюминий - сера разбавлялась инертом (графитом) в пропорции 2/1, где две массовые доли приходятся на графит, а одна – на смесь Al-S, для снижения последствий реакционного взаимодействия алюминия с серой и реализации в эксперименте процессов компактирования.

Массовые доли компонентов в образце (смеси) были следующие: Al - 11.5, S - 21.5, C - 67; объемные доли: Al -9.55, S - 23.35, C - 67.1. Смешивание компонентов производилось в планетарной мельнице АГО-2У, затем смесь прессовалась в таблетки диаметром 14 мм, толщиной 8 мм. Измеренная пористость - 0.393±0.005. Таблетки в количестве 8 штук помещались в стальную ампулу с внутренним диаметром 14 мм, внешним 20 мм, длиной 84 мм. С краев ампула закрывалась пробками (рис. 19а). Нагружение производилось зарядом - 6ЖВ+NaCl в пропорции 1/1 по массе. Измеренная плотность ВВ - 1.2 г/см^3. Внешний диаметр заряда 50 мм. Измеренная скорость детонации - 2.8 км/с.



а б

Рис. 19. Ампула до (а) и после (б) эксперимента.

Для определения фазового состава образца ампула была распилена в месте расположения образца по высоте с интервалом в 1 сантиметр. После этого по центру каждой из отпиленной части ампулы последовательно просверливались отверстия сверлами возрастающего диаметра. Стружка после каждого прохода сверлом исследовалась на дифрактометре. Таким способом восстанавливалось распределение фаз по радиусу и длине образца.

Примерно в 15 мм от верхнего края образца наблюдалось начало образования центральной зоны, отличающейся по цвету и, соответственно, по фазовому составу от периферийной части (рис. 20).

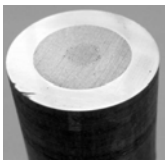


Рис. 20. Средняя часть образца.

При приближении к нижней части образца диаметр центральной зоны увеличился. Фазовый анализ материала из центральной зоны показал, что она состоит из смеси графита и продукта взаимодействия алюминия и серы - сульфида алюминия. Степень компактирования образца ~ 97%.

Для сравнения с результатами экспериментов, численно в осесимметричной постановке была рассмотрена задача взрывного нагружения стальной цилиндрической ампулы, содержащей инерт-

ную пористую смесь алюминий-сера-графит в таких же массовых и объемных долях, как в эксперименте. Действие продуктов взрыва на торцевую часть ампулы и на ее боковые стенки моделировалось с учетом результатов, представленных в подразделе 5.1. На рис. 21 представлены расчетные конфигурации в разные моменты времени, характеризующие процесс компактирования инертной пористой смеси.

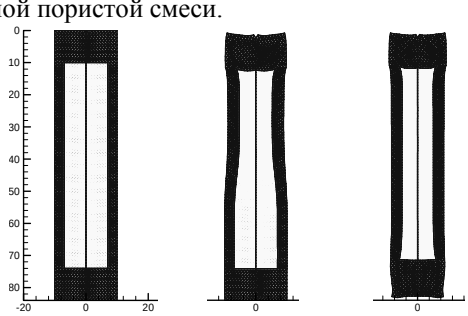


Рис. 21. Стадии взрывного компактирования в различные моменты времени процесса: а - t = 0 мкс, б – 20 мкс, с – 40 мкс.

Результаты численных расчетов показали, что степень компактирования пористого образца составила почти 100%. Ампула после взрывного компактирования сжата достаточно однородно по всей высоте, а ее форма качественно и количественно совпадает с формой ампулы в эксперименте.

В подразделе 5.3 представлены экспериментальные и численные результаты по взрывному нагружению реагентной пористой смеси алюминий-сера. Массовые доли компонентов в образце были следующие: Al - 35, S - 65; объемные доли: Al - 29, S - 71. Технология смешивания и прессования смеси Al-S в таблетки, а также нагружение ампулы были такими же, как в эксперименте со смесью Al-S-C.

Рис. 22. Вид ампулы после эксперимента.

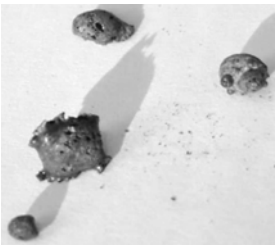


Рис. 23. Застывшие капли сульфида алюминия.

В процессе нагружения ампула вскрылась (рис. 22). Детонация ВВ шла со стороны не вылетевшей пробки. Ампула сначала вскрылась в нижней части, после чего вскрылась по всей длине. После проведения эксперимента на внутренней поверхности ампулы было обнаружено много застывших капель размером до 4 мм (рис. 23). Рентгенофазовый анализ собранного из ампулы материала показал, что это сульфид алюминия Al_2S_3.

Для сравнения с данным экспериментом, численно в осесимметричной постановке была рассмотрена задача взрывного нагружения стальной цилиндрической ампулы, содержащей реагирующую пористую смесь Al-S. Химическая реакция может начинаться при выполнении критерия либо по температуре T_η = 392.5 К (температура плавления серы), либо по давлению P_η = 2 ГПа. Скорость химических превращений K_0 была задана в первом случае 240.8 ГДж/(кг*с), во втором – 4816 ГДж/(кг*с).

Рис. 24 демонстрирует распределение изолиний согласованного давления в смеси реагирующих пористых компонентов Al-S, характеризуя динамику ударно-волнового процесса при взрывном синтезе Al_2S_3.

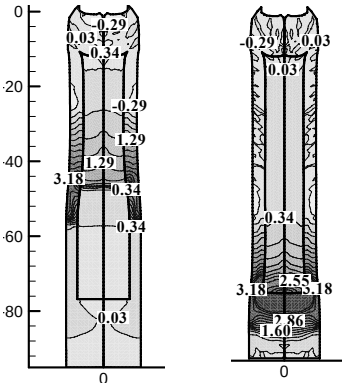


Рис. 24. Распределение изолиний согласованного давления (ГПа) в смеси реагирующих пористых компонентов Al-S в осевом сечении ампулы (слева - t = 20 мкс), справа - t = 31 мкс).

На рис. 25 представлены графики изменения массовой доли продукта реакции сульфида алюминия в центральной и нижней части ампулы в зависимости от времени, что характеризует полноту реакции в смеси.

В центральной части образца к 14 мкс процесса взрывного нагружения выполняется критерий по давлению, химическая реакция протекает с высокой скоростью (рис. 25а). Степень полноты реакции достигает значение 0.4 до момента спада давления. После спада давления в смеси продолжает выполняться критерий по температуре, скорость реакции падает и реакция завершается полностью к примерно 27 мкс процесса.

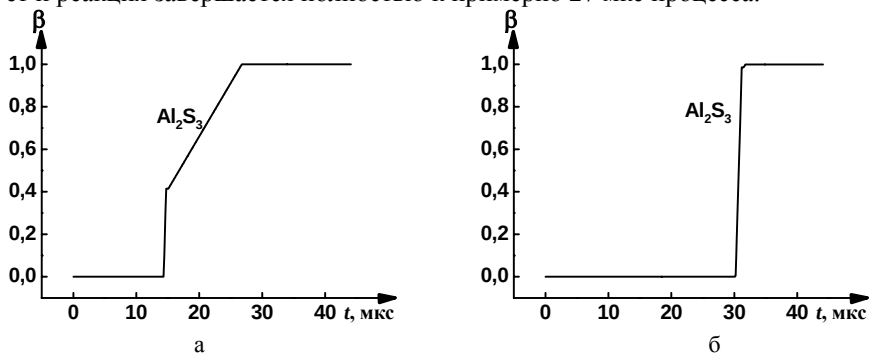


Рис. 25. Изменение массовых долей продукта реакции в центральной (а) и нижней (б) части ампулы.

В нижней части ампулы (рис. 25б) реакция протекает за 1 мкс процесса вследствие отражения ударной волны от дна ампулы и резкого повышения давления (рис. 24, t = 31 мкс). Реакция в этой части ампулы инициируется и протекает именно в отраженной ударной волне, т.к. в проходящей ударной волне в этой области ампулы критерии как по давлению, так и по температуре, не выполнялись. В отличие от остальной области ампулы, реакция в нижней части ампулы протекает полностью в ударной волне.

Исходя из анализа численных и экспериментальных результатов можно предположить, что высокая скорость тепловыделения в ходе химической реакции приводит к частичному испарению продукта реакции, что в свою очередь ведет к росту давления в данной области, что, с одной стороны, ускоряет химическую реакцию в оставшейся области смеси, а с другой – приводит к разрушению ампулы, причем процесс разрушения инициируется именно в нижней части ампулы, что наблюдается в эксперименте.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Развита модель многокомпонентной среды для численного моделирования поведения инертных и реагентных материалов при взрывном и ударно-волновом нагружении с использованием феноменологической модели вынужденных твердофазных химических реакций нулевого порядка

2. Выбрано и адаптировано условие равенства давлений в качестве условия совместного деформирования компонентов смеси для численного описания поведения инертных и реагирующих пористых смесей при взрывном и ударно-волновом нагружении.

3. Выявлено, на основе разработанной модели многокомпонентной среды, что процесс ударно-волнового компактирования пористых инертных смесей включает в себя от одной до трех стадий. На первой стадии происходит прессование при относительно низких давлениях. На второй стадии развиваются высокие давления, и происходит вызванная ими допрессовка материала. На третьей стадии происходит рост пор под действием растягивающих напряжений. В случае реагирующих пористых смесей выявлено, что процесс ударно-волнового синтеза сульфида алюминия на первой стадии включает в себя процесс компактирования, затем возникает и развивается реакция синтеза сульфида алюминия при превышении критического значения по температуре.

4. Определены оптимальные параметры как процесса динамического компактирования, так и процесса взрывного и ударно-волнового синтеза уплотняемых материалов с целью обеспечения максимальной плотности конечных продуктов.

5. Установлено, что увеличение скоростей ударника и, соответственно, давлений и температур, не приводит к увеличению плотностей конечных продуктов и может привести к получению конечных продуктов с достаточно низкой плотностью или явиться причиной для образования полостей в материалах.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Зелепугин С.А., Никуличев В.Б., Иванова О.В., Зелепугин А.С. Моделирование химических превращений в системе титан – кремний при ударно-волновом нагружении // **Химическая физика**. – 2005. - Т. 24. - № 10. - С. 76-82.
2. Иванова О.В., Зелепугин С.А. Многокомпонетная модель среды для численного моделирования ударно-волнового воздействия на реагирующие пористые смеси // **Изв. ВУЗов. Физика**. - 2008. - Т. 51. - № 8/2. - С. 180-189.
3. Зелепугин С.А., Никуличев В.Б., Иванова О.В. Моделирование твердофазных химических превращений в пористых смесях при ударно-волновом нагружении // **Горение и плазмохимия**, 2005. - Т. 3. - № 3. -С. 235-245.
4. Иванова О.В., Зелепугин С.А. Условие совместного деформирования компонентов смеси при ударно-волновом компактировании // **Вестник ТГУ. Математика и механика**. – 2009. № 1 (5). - С. 54-61.
5. Zelepugin S.A., Nikulichev V.B., Ivanova O.V. Simulation of solid-phase chemical reactions in porous mixtures under shock wave loading // **Eurasian Physical Technical Journal**. – 2008. - V.5. - №2 (10). - P. 44-50.
6. Иванова О.В. Численное моделирование ударно-волнового нагружения пористой смеси Al - S на основе многофазной модели среды // Физика и химия высокоэнергетических систем: Сборник материалов III Всероссийской конференции молодых ученых (24-27 апреля 2007 г., Томск). – Томск: ТМЛ-Пресс, 2007. – С. 163-166.
7. Иванова О.В., Зелепугин С.А. Моделирование поведения многокомпонентных сред при высоких давлениях и температурах // Сопряженные задачи механики реагирующих сред, информатики и экологии: Материалы Международной конференции. - Томск: Изд-во Том. ун-та, 2007. - С. 90-91.
8. Иванова О.В., Зелепугин С.А. Моделирование процессов динамического компактирования на основе многокомпонентной модели среды // Проблемы механики сплошных сред и физики взрыва. Тезисы докладов Всеросс. конф., посвященной 50-летию Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН. 17 – 22 сентября 2007 г., Новосибирск. – Новосибирск: ИГиЛ СО РАН, 2007. - С. 92-93.
9. Иванова О.В., Зелепугин С.А. Влияние динамического воздействия на гетерогенные пористые среды, способные к фазовым превращениям // Все-

российская конференция по математике и механике, 22 -25 сентября 2008г., Томск. - Изд-во Том. ун-та, 2008. - С. 197.
10. Зелепугин С.А., Иванова О.В. Численное моделирование динамического компактирования пористой смеси алюминий – сера на основе многокомпонентной модели среды // II Международный семинар «Гидродинамика высоких плотностей энергии», 13-18 июля 2008 г., Новосибирск. - Новосибирск: ИГиЛ СО РАН, 2008. - С. 46-47.
11. Иванова О.В., Зелепугин С.А. Ударно-волновое нагружение цилиндрической ампулы с химически активной смесью// Международная конференция, Лаврентьевские чтения по математике, механике и физике, 27-31 мая 2005г., г. Новосибирск, Институт гидродинамики. М.А. Лаврентьева СО РАН, 2005. – С. 214.
12. Зелепугин С.А., Никуличев В.Б., Иванова О.В. Моделирование твердофазных химических превращений в пористых смесях при ударно-волновом нагружении// III Международный симпозиум «Горение и плазмохимия», 24-26 августа 2005 г., г. Алматы, Институт проблем горения, 2005. - С. 166-168.
13. Zelepugin S.A., Nikulichev V.B., Ivanova O.V. Numerical simulation of superfast shock-induced chemical reaction in titanium-silicon mixture // Proceedings of the Conference of the American Physical Society Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter, Baltimore, Maryland, USA, July 31 – August 5, 2005 / edited by M.D. Furnish, M. Elert, T.P. Russell, and C.T. White. – Melville, New York: AIP CP 845, 2006. - P. 1177-1180.
14. Иванова О.В. Численное исследование особенностей развития химических реакций в пористых смесях при высокоскоростном ударе // Сборник материалов международной школы-конференции молодых ученых, 13-16 декабря 2005г., Томск, Томский государственый университет, 2005. – С. 864-866.
15. Иванова О.В., Зелепугин С.А. Ударно-волновые процессы и вынужденные химические превращения в пористой смеси // Фундаментальные проблемы новых технологий в 3-м тысячелетии: Материалы 3-й Всероссийской конференции молодых ученых. - Томск: Изд-во Института оптики атмосферы СО РАН, 2006. – С. 284-286.
16. Иванова О.В. Условия протекания сверхскоростных химических реакций в пористых смесях в условиях ударно-волнового нагружения // Физика и химия высокоэнергетических систем: Сборник материалов II Всероссийской конференции молодых ученых, Томск, 4-6 мая 2006 г. – Томск: Изд-во Томского гос. ун-та, 2006. – С. 212-214.
17. Zelepugin S.A., Nikulichev V.B., Ivanova O.V. Numerical simulation of shock-induced solid-solid reactions in porous media // Shock-Assisted Synthesis and Modification of Materials / edited by A.A. Deribas and Yu.B. Scheck. – Moscow: TORUS PRESS, 2006. - P. 139-141.

18. Ivanova O.V., Zelepugin S.A. Numerical simulation of shock-induced chemical reaction using a multiphase medium model // IX International Symposium on Self-propagating High-temperature Synthesis, Dijon, France, July 1 – 5, 2007, T1_P02.
19. Ivanova O.V., Zelepugin S.A. A multicomponent medium model for numerical simulation of shock-wave loading of reacting porous mixtures // 7th Bienniale International Conference «New models and Hydrocodes for Shock Wave Processes in Condensed Matter», Lisbon-Monte Estoril, Portugal, 18-23 May 2008. – P. 35-36.