

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 96 за 2016 г.</u>



ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

Забродина Е.А., <u>Орлов Ю.Н.</u>, Соловьев В.О., Овчинников Н.М.

О моделях развития детонации в цилиндрическом канале

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: О моделях развития детонации в цилиндрическом канале / Е.А.Забродина [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 96. 17 с. doi:<u>10.20948/prepr-2016-96</u> URL: <u>http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-96</u>

Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В.Келдыша Российской академии наук

Е.А. Забродина, Ю.Н. Орлов, В.О. Соловьев, Н.М. Овчинников

О моделях развития детонации в цилиндрическом канале

Забродина Е.А., Орлов Ю.Н., Соловьев В.О., Овчинников Н.М.

О моделях развития детонации в цилиндрическом канале

В работе анализируются результаты расчетов по газодинамической программе H3T применительно к задаче развития детонации в конечном прямом цилиндрическом канале. Сравнивались режимы распространения детонационной волны в зависимости от энергии инициирования, которые были получены для двух моделей термического разложения взрывчатого вещества. Выяснилось, что при одинаковых условиях инициирования взрывчатых веществ (BB), но для разных моделей распространения детонационной волны различаются, причем области наибольшего различия в газодинамических параметрах весьма чувствительны к расчетной схеме и мелкости пространственно-временной сетки.

Ключевые слова: математическое моделирование, инициирование взрывчатых веществ, модель Тарвера, детонация в цилиндрическом канале

Zabrodina E.A., Orlov Yu.N., Soloviev V.O., Ovchinnikov N.M.

On the models of detonation in a cylindrical channel

The numerical results of detonation modeling in a cylindrical channel, obtaining with the use of gas dynamic numerical program H3T, are investigated. The various regimes of detonation are compared for the same initial conditions but for two models of explosion. It is obtained, that critical point of pressure is not stable numerically with respect to the explosion model.

Key words: mathematical modeling, explosion initiation, Tarver model, detonation in a cylinder

Содержание

Введение	3
1. Постановка задачи	4
2. Две модели термического разложения ВВ	6
3. Результаты расчетов по модели I	7
4. Результаты расчетов по модели II	10
5. Сравнительный анализ режимов развития детонации	13
5. Заключение	15
Литература	16

Введение

В предшествующих работах авторов [1-2] были представлены результаты численного моделирования развития детонации в цилиндрическом канале, а также в каналах в форме усеченного конуса и нескольких вложенных цилиндров разного диаметра (работы [3-4]), соединяемых через усеченные конусы. Анализировались режимы инициирования, при которых взрывчатое вещество (далее ВВ) детонировало. В настоящей работе проводится сравнительный анализ двух моделей развития детонации на основе численного моделирования распространения ударной волны в цилиндрическом канале по двумерной газодинамической программе НЗТ [5]. Основная проблема состоит в том, что, как показывают численные эксперименты, результаты расчетов развития детонации в канале, полученные в рамках разных полуэмпирических моделей, заметно различаются, что следует учитывать при проведении численной оптимизации параметров проектируемого изделия. Мы покажем, что в вычислительном эксперименте обнаруживаются режимы инициирования, при которых распространение ударной волны в канале существенно зависит от модели взрывного разложения взрывчатого вещества. Такие ситуации требуют более тщательного экспериментального исследования.

Задача оптимизации изделия осложняется также и тем, что в расчетах используются модели взрывного разложения уравнения состояния И взрывчатых веществ, параметры в которых определяются экспериментально, причем в научных статьях, где такие уравнения представлены, не приводятся данные по условиям проведения эксперимента, количеству экспериментальных точек, используемых для определения параметров уравнений, статистической точности аппроксимации экспериментальных данных в виде тех или иных соответствующих детерминации зависимостей, модельных кривых, доверительных интервалов для параметров уравнений состояния. С одной стороны, такое положение дел вполне объяснимо, поскольку статьи по своему формату не являются научно-техническими отчетами или лабораторными журналами. Однако отсутствие указанной информации затрудняет проведение корректных расчетов в задачах оптимизации, а также, например, не позволяет провести скейлинг параметров уравнения взрывного разложения в зависимости от калибра изделия. В результате получается, что оптимальные параметры изделия, вычисленные в рамках одной модели, не совпадают (в рамках принятой точности) с параметрами, определенными по другой модели.

Также существенно и то, что численная схема, по которой проводятся расчеты, не всегда оказывается устойчивой к изменению уравнений модели, так что на результаты оказывает определенное влияние и вычислительный фактор. Авторы настоящей работы считают важным обратить внимание исследователей в этой области на данное обстоятельство. Универсальный вычислительный алгоритм, пригодный к расчетам в широких диапазонах значений параметров и их градиентов для разных макроскопических моделей химической кинетики, разработать довольно сложно, поэтому практически необходимо иметь представление о критических в вычислительном плане местах алгоритма.

1. Постановка задачи

Математическая модель развития детонации в канале состоит из уравнений газовой динамики, уравнений состояний вещества в твердой и газообразной фазах, уравнений химической кинетики, а также источниковых членов и граничных условий.

Движение вещества в цилиндрическом канале описывается системой уравнений газовой динамики в двумерной цилиндрически симметричной постановке:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho \vec{u}) = 0,$$
(1)
$$\frac{\partial (\rho \vec{u})}{\partial t} + div(\rho \vec{u} \vec{u}) + grad(p) = 0,$$
(2)

$$\frac{\partial \left[\rho\left(\varepsilon + 0.5\left|\vec{u}\right|^{2}\right)\right]}{\partial t} + div\left[\rho\vec{u}\left(\varepsilon + 0.5\left|\vec{u}\right|^{2}\right) + p\vec{u}\right] = Q.$$
(3)

Здесь ρ – плотность, u – скорость, ε – удельная внутренняя энергия, p – давление, Q – источник энерговыделения. Эта система дополняется начальными и граничными условиями, а также уравнением состояния для конкретного взрывчатого вещества. Рассматривается двухкомпонентная смесь исходного взрывчатого вещества (ТЭН) и газообразных продуктов его разложения. Вводятся концентрации для каждой компоненты X_k , k=1,2, так что $\sum_k X_k = 1$.

Для рассматриваемых компонент выполняются соотношения:

$$\rho_k = \rho \cdot X_k, \quad v_k = 1/\rho_k, \quad p = \sum_k p_k, \quad \varepsilon = \sum_k \varepsilon_k \cdot X_k.$$
(4)

$$p_k = p_k^{(P)} + p_k^{(I)}$$
(5)

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k^{(P)} + \varepsilon_k^{(I)}$$

$$(6)$$

$$n_k^{(P)} = A_k \cdot \exp(-R_{kk} \rho_{kk} v_k) + B_k \cdot \exp(-R_{kk} \rho_{kk} v_k)$$

$$(7)$$

$$p_{k}^{T} = A_{k} \cdot \exp(-R_{1k}\rho_{0k}v_{k}) + B_{k} \cdot \exp(-R_{2k}\rho_{0k}v_{k})$$
(7)
(7)
(7)
(7)

$$p_k^{(T)} = \frac{g_k c_{\nu k} T}{v_k} \tag{8}$$

$$\varepsilon_{k}^{(P)} = \frac{A_{k}}{R_{1k}\rho_{0k}} \cdot \exp(-R_{1k}\rho_{0k}v_{k}) + \frac{B_{k}}{R_{2k}\rho_{0k}} \cdot \exp(-R_{2k}\rho_{0k}v_{k})$$
(9)

$$\varepsilon_k^{(T)} = c_{\nu k} T \tag{10}$$

Для каждой компоненты *k* используются уравнение состояния Джонса-Уилкинса-Ли (JWL [6]), параметры которого согласно [7, 8] приведены в таблице 1. Подчеркнем, что все указанные параметры получены не теоретическим путем, а в результате эксперимента.

k	$ ho_{0k},$ кг/м ³	<i>А_k</i> , Па	<i>B</i> _{<i>k</i>} , Па	<i>с_{vk}∙р</i> 0k, Па/град.	R_{1k}	R_{2k}	g_k
1	1000	1312·10 ⁹	-7.84·10 ⁹	1.6766 .10 ⁶	11.	5.5	0.02027
	1600	2188·10 ⁹	-58·10 ⁹	2.685·10 ⁶	7.8	3.9	0.3468
	1720	3466·10 ⁹	-330·10 ⁹	2.887·10 ⁶	10.	5.	0.7556
2	1000	237.2·10 ⁹	10.61·10 ⁹	10 ⁶	5.6	1.8	0.24
	1600	625.3·10 ⁹	23.29·10 ⁹	106	5.25	1.6	0.28
	1720	617·10 ⁹	16.926·10 ⁹	10 ⁶	4.4	1.2	0.25

Таблица 1. Параметры уравнения состояния

Энерговыделение вследствие реакции разложения ТЭНа описывается уравнением

$$Q = -\rho Q_0 \cdot \frac{dX_1}{dt} \quad Q_0 = 5.706 \cdot 10^6 \, \text{Дж/кг.}$$
(11)

Расчетная область представляет собой продольный разрез внутренней части цилиндра длиной 10^{-2} м, разделенной на две подобласти: область инициирования ($0 < l < 1.5 \cdot 10^{-4}$ м) и область распространения детонационной волны ($1.5 \cdot 10^{-4}$ м $< l < \cdot 10^{-2}$ м). Внутренний радиус цилиндра равен $r = 1.5 \cdot 10^{-3}$ м, внешний радиус $R = 4 \cdot 10^{-3}$ м. В обеих областях задаются одинаковые начальные условия: $\rho = 1000$ кг/м³, $\varepsilon = 0.501 \cdot 10^{6}$ Дж/кг, что соответствует давлению $p = 0.1053 \cdot 10^{6}$ Па = 1 атм и температуре $T \approx 300$ К.

В области инициирования для расчета концентраций используется уравнение

$$\frac{dX_1}{dt} = -C \cdot X_1, \quad X_2 = 1 - X_1, \tag{12}$$

где величина *С* связана с энергией инициирования (т.е. температурой взрывчатого вещества) по формуле Аррениуса:

$$C = J \exp(-\frac{A}{RT}), \qquad (13)$$

где для ТЭНа, согласно [8], $J = 3.54 \times 10^{19}$ сек⁻¹, A = 160 кДж/моль – энергия активации, а R – газовая постоянная. Температура T в области инициирования рассчитывается по энергии электроинициирования E, вносимой в первую расчетную зону в течение 0,1 мкс. В расчетах оптимизации модели удобнее задавать непосредственно величину C (13), а не энергию инициирования, поскольку измерить последнюю с достаточной точностью весьма сложно. Для этого следует задать определенный закон преобразования электрической энергии в энергию (тепловую и механическую) собственно BB. Процесс инициирования удобнее всего моделировать константой скорости реакции в уравнении (12), учитывая, что при достаточной точности измерений эта величина может быть определена в соответствии с (13).

2. Две модели термического разложения ВВ

В области распространения детонационной волны используются различные модели взрывного разложения ТЭНа степенного вида, в которых показатели степеней определялись эмпирически. Так, в работе [9] Тарвера и соавторов использовалось уравнение

$$\frac{dX_1}{dt} = -\left[I \cdot X_1^{2/9} \cdot \eta^4 + G \cdot X_1^{2/9} \cdot X_2^{2/3} \cdot p^z\right],\tag{14}$$

$$\eta = \begin{cases} \frac{\rho X_1}{\rho_0} - 1, & \rho X_1 > \rho_0 \\ 0, & \rho X_1 \le \rho_0 \end{cases}$$
(15)

а параметры равны $I = 2 \cdot 10^7$ сек⁻¹, $G = 4 \cdot 10^8$ Мбар^{-z} · сек⁻¹, z = 1.4.

В частности, по этому же уравнению авторами настоящей работы в публикациях [8, 9] проводились расчеты развития детонации в каналах различной формы.

Однако в другой работе [10] Мэй и Тарвер предлагают вместо (14) использовать двучленное уравнение:

$$\frac{dX_1}{dt} = -\left| I \cdot X_1^{0.667} \cdot \left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1\right)^9 \right|_{X_2 < 0.1} + \begin{cases} G_1 \cdot X_1^{0.667} \cdot X_2^{0.04} \cdot p, & npu \ X_2 \le 0.04 \\ G_2 \cdot X_1^{0.667} \cdot X_2^{0.667} \cdot p^2, & npu \ X_2 > 0.04 \end{cases}$$
(16)

где $I = 22 \cdot 10^{10}$ сек⁻¹, $G_1 = 55 \cdot 10^6$ Мбар⁻¹сек⁻¹, $G_2 = 8000 \cdot 10^6$ Мбар⁻²сек⁻¹, [p] = 1 Мбар.

Уравнений такого типа существует довольно много. Каждое из них применяется для описания развития детонации ВВ в каналах определенного размера и формы, но в каждом конкретном случае не всегда ясно, подходит ли именно эта модель к рассматриваемой ситуации. Вследствие указанной неопределенности представляется интересным сравнить результаты расчетов, например, по двум моделям: (14-15) – модель I, (16) – модель II. Эти модели рассматриваются далее как базовые для задачи оптимизации геометрии и режимов инициирования электродетонаторов (см. [11-16]).

Основная вычислительная проблема состоит в том, что правые части как модели I, так и модели II не являются непрерывно дифференцируемыми функциями концентраций, а модель II, кроме того, и вовсе не обладает непрерывной правой частью. В зависимости от шага дискретизации эти особенности моделей могут приводить при численных расчетах К нефизическим эффектам. В окрестности переходных режимов – например, с горения на детонацию – эти эффекты могут стать ключевыми и повлиять на выбор оптимальной конструкции изделия. Такие примеры и приводятся в настоящей работе с целью продемонстрировать наличие вычислительной проблемы и необходимости экспериментального тестирования параметров моделей в каждом конкретном случае применительно к реальной ситуации.

3. Результаты расчетов по модели I

Олной ИЗ целей моделирования является определение энергии которой развивается детонационный инициирования, при режим И одновременно давление в канале остается меньше критического, при котором происходит разрушение канала до того момента, когда ударная волна доходит до конца канала (в последнем случае изделие срабатывает неправильно, разрушаясь слишком рано). Представляет интерес сравнение ситуаций вблизи критического в этом смысле значения параметра C, которое в модели I оказалось равным C=3.e5. Далее на рис. 1-6 приведены результаты расчетов для двух значений параметра С: 3.е5 и 6.е5.



Рис. 1. Давление [Pa] в цилиндре на разные моменты времени [c] при $C = 3 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$, вариант I.



Рис. 2. Температура [K] в цилиндре на разные моменты времени [c] при $C = 3 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$, вариант I.



Рис. 3. Концентрация BB в цилиндре на разные моменты времени [c] при $C = 3 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$, вариант I.



Рис. 4. Давление [Pa] в цилиндре на разные моменты времени [c] при $C = 6 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$, вариант I.



Рис. 5. Температура [K] в цилиндре на разные моменты времени [c] при $C = 6 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$, вариант I.



Рис. 6. Концентрация BB в цилиндре на разные моменты времени [c] при $C = 6 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$, вариант I.

4. Результаты расчетов по модели ІІ

На рис. 7-12 представлены аналогичные результаты расчетов по модели II.

Рис. 7. Давление [Pa] в цилиндре на разные моменты времени [c] при $C = 3 \cdot 10^5$ с⁻¹, вариант II.

Рис. 8. Температура [K] в цилиндре на разные моменты времени [c] при $C = 3 \cdot 10^5$ с⁻¹, вариант II.

Рис. 9. Концентрация BB в цилиндре на разные моменты времени [c] при $C = 3 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$, вариант II.

Рис. 10. Давление [Pa] в цилиндре на разные моменты времени [c] при $C = 6 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$, вариант II.

Рис. 11. Температура [K] в цилиндре на разные моменты времени [c] при $C = 6 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$, вариант II.

Рис. 12. Концентрация BB в цилиндре на разные моменты времени [c] при $C = 6 \cdot 10^5$ c⁻¹, вариант II.

5. Сравнительный анализ режимов развития детонации

Полезно сравнить скорости распространения ударной волны в канале и пиковые значения давлений при различных значениях параметра *C* по двум моделям. В частности, из рис. 4 и рис. 10 видно, что в первом случае детонация развивается к концу прохождения расчетной зоны, а вторая модель дает при тех же начальных условиях всего лишь обычное горение. Профили температур и концентраций также показывают различие моделей. Примеры расчетных давлений при различных энергиях инициирования приведены на рис. 13.

Рис. 13. Максимальное давление [Ра] в области детонации в зависимости от времени при различных параметрах *С* для двух моделей скорости горения: штриховые линии – вариант I, сплошные – вариант II.

Из рис. 13 видно, что при малых энергиях инициирования, т.е. в режиме обычного горения обе модели дают практически одинаковые результаты, тогда как в режиме детонации даже вблизи критического параметра *C* результаты получаются существенно разными.

На рис. 14-16 показаны расчетные величины выгорания BB, максимального давления в канале и скорости фронта ударной волны по двум моделям.

Рис. 14. Окончательная концентрация исходного вещества в области распространения волны в зависимости от параметра *C*: штриховая линия – вариант I, сплошная – вариант II.

Рис. 15. Зависимость абсолютного максимума давления [Ра] в области распространения волны от заданного параметра *С* для двух моделей горения.

Рис. 16. Скорость фронта [m/c] ударной волны в зависимости от заданного параметра *C*.

6. Заключение

Резюмируя итоги исследования, можно сделать выводы об основных различиях двух данных моделей развития детонации.

1) При $5*10^3 \le C \le 2*10^5$ (т.е. там, где разложение ТЭНа совсем слабое) результаты расчетов по обеим моделям близки. По каналу распространяется ударная волна примерно с постоянным давлением на фронте, хотя форма фронта несколько различается.

2) При $C \ge 3*10^5$ различия становятся заметными. Если в варианте I давление за фронтом растет со временем, то в варианте II оно падает.

3) В варианте I ударная волна становится детонационной при значении $C = 10^6$, в варианте II – при $C = 10^7$.

4) Переход через критическое давление в области поджига в обоих вариантах наступает при $C = 6 \cdot 10^5$ близко к началу процесса, приблизительно за время $t \approx 10^{-6}$ с.

5) Так как в варианте I давление в ударной волне нарастает со временем, то переход через критическое давление в области детонации происходит при меньших, чем в II, значениях C ($C = 4.10^5$) примерно в середине канала ($x \approx 0.00467$ м) ближе к концу расчета ($t \approx 11$ мкс), когда фронт волны находится уже на координате x = 0.0084 м. В варианте II ударная волна является затухающей, поэтому ее максимальное давление привязано к области

инициирования. Оно достигает критического уровня при $C = 6 \cdot 10^5$ вблизи области инициирования в точке $x \approx 0.000532$ м через промежуток времени $t \approx 1.7$ мкс после начала процесса, когда фронт волны находится только в координате x = 0.0013 м.

Полученные выводы в результате проведения численных экспериментов по программе H3T показывают, что, несмотря на определенную близость моделей взрывного разложения, свойства решений по ним оказываются существенно различными.

Литература

1. Соловьев В.О., Забродина Е.А., Овчинников Н.М., Орлов Ю.Н. Расчеты развития детонации в цилиндрическом канале по программе НЗТ // Проблемы машиностроения и автоматизации. Международный журнал. № 4, 2015, с. 105-110.

2. Соловьев В.О., Забродина Е.А., Овчинников Н.М., Орлов Ю.Н., Пацюк В.В. Двумерные расчеты развития детонации в канале переменного сечения по программе НЗТ // Проблемы машиностроения и автоматизации. Международный журнал. № 1, 2016, с. 109-114.

3. Орлов Ю.Н., Овчинников Н.М., Соловьев В.О., Суслин В.М. Расчет поведения ударной волны в канале переменного сечения // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2011. № 27. С. 1-19.

4. Орлов Ю.Н., Соловьев В.О., Овчинников Н.М., Пацюк В.В., Суслин В.М. Расчет распространения ударной волны в канале детонатора и оптимизация параметров инициирования зарядов ВВ // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2014. № 105. С. 1-21.

5. Забродин А.В., Прокопов Г.П. Методики численного моделирования двумерных нестационарных течений теплопроводного газа в трехтемпературном приближении // ВАНТ, сер.: Математическое моделирование физических процессов, 1998, вып.3. С.3 - 16.

6. Lee E.L., Tarver C.M. Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives // Physics of Fluids, 1980, V.23, No 12, p.2363-2372.

7. Горбатенко А.А. Анализ уравнения состояния продуктов детонации JWL // Молодежный научно-технический вестник. № 3, 2012, с. 1-5.

8. Rimoli J.J., Gurses E. and Ortiz M. Shock-induced subgrain microstructures as possible homogenous sources of hot spots and initiation sites in energetic polycrystals // Phys. Rev. B 81, January, 2010.

9. Tarver C.M., Hallquist J.O., Ericson L.M. Modeling Short Pulse Duration Shock Initiation of Solid Explosives // VIII Symp. On Detonation, NSWC, Albuquerque, NM, 1985, p. 951-961.

10. Орлов Ю.Н., Соловьёв В.О., Суслин В.М. Расчет поведения ударной волны в каналах детонатора // Проблемы машиностроения и автоматизации. Международный журнал. №4, 2011, с.112-117. 11. Орлов Ю.Н., Соловьёв В.О., Суслин В.М. Оптимизация режима инициирования детонации в каналах переменного сечения. // Проблемы машиностроения и автоматизации. Международный журнал. №4, 2012, с.69-74.

12. May C.M., Tarver C.M. Modeling Short Shock Pulse Duration Initiation of LX-16 and LX-10 Charges // APS Shock Compression of Condensed Matter, Nashville, TN, 2009.

13. Соловьев В.О. Средства инициирования для твердотопливных пульсирующих взрывных устройств // Боеприпасы и спецхимия. Научнотехнический журнал. № 3, 2007, с. 57-62.

14. Соловьев В.О., Овчинников Н.М., Пацюк В.В., Лавров В.В. Специальные электрические детонаторы нового поколения //Проблемы машиностроения и автоматизации. Международный журнал. №1, 2015, с. 88-99.

15. Соловьёв В.О., Думенко В.И. Электродетонатор и электровоспламенитель для него // МКИ: 6 F 42 B 3/13, Патент № 2056034, РФ, приоритет от 30.03.1992г. Опубликовано в Официальном бюллетене. «Изобретения. Полезные модели» №7 от 10.03.1996г., ФИПС РОСПАТЕНТ.

16. Соловьев В.О., Овчинников Н.М., Орлов Ю.Н., Пацюк В.В. и др. Вибрационные процессы, виброзащита в машиноведении // Отчет о НИР № 2237-р, 03.12.2012, ФАНО.