

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕЗОСТРУКТУРЫ ТЕЧЕНИЯ ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ ДЕТОНАЦИИ В ГЕТЕРОГЕННЫХ ВВ

С.А. Медин, А.Н. Паршиков

*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва,
125412, Ижорская улица, 13, строение 2*

Аннотация

Проведено численное моделирование мезоструктуры течения за фронтом детонационной волны, распространяющейся по гетерогенному взрывчатому веществу (тэн) и содержащему регулярные включения флегматизатора (парафин). Частицы флегматизатора рассматриваются как инертные включения, не вступающие в химическую реакцию с продуктами детонации. Взрывчатое вещество детонирует по модели Чепмена – Жуге. Задача решалась в плоской двумерной постановке методом SPH. Определено влияние на гидродинамику течения взаимодействие продуктов детонации ВВ с частицами флегматизатора. Выявлены эффекты дифракции детонационной волны на инертных включениях. Получены зависимости скорости детонации от состава гетерогенного ВВ. Проведены расчеты для пористого ВВ (тэна).

MESOMECHANICAL SIMULATION OF DETONATION IN HETEROGENEOUS EXPLOSIVE

Computer simulation of flow mesostructure behind the detonation wave front is performed, detonation wave traveling through a heterogeneous explosive with regular phlegmatizer (paraffin) inclusions. The phlegmatizer particles are considered as inert inclusions that do not react with detonation products. An explosive detonation is described by the Chapman – Juge model. The simulation is realized in a plane 2-D approximation using modified SPH method. The influence of interaction processes between detonation products and particles of paraffin on hydrodynamics of flow is determined. The effects of detonation wave diffraction around inert inclusions are revealed. The dependence of detonation wave velocity on the composition of the explosive is obtained. Computations for the porous explosive are performed.

1. ВВЕДЕНИЕ

Целью данной работы является изучение влияния на распространение детонационной волны гидродинамических эффектов в продуктах детонации, обусловленных мезоструктурой гетерогенных ВВ, содержащих инертные включения. В настоящей работе учитывается механическое взаимодействие инертных включений с продуктами детонации. Процесс детонации гетерогенных и пористых ВВ интенсивно изучается и завершённой теории, исчерпывающей все особенности описания детонации таких ВВ, пока ещё нет. В монографиях [1] и [2] приведен большой массив обширных экспериментальных и теоретических результатов разных авторов по детонации флегматизированных ВВ. Термодинамические расчёты из упомянутых работ основаны на рассмотрении гетерогенного ВВ как однородной среды, состоящей из двух взаимопроникающих континуумов (ВВ и парафин) – это смесевые модели, не учитывающие мезоструктуры ВВ. В термодинамических моделях предполагается, что при распространении детонационной волны флегматизирующие добавки частично разлагаются между химическим пиком и плоскостью Чепмена – Жуге и взаимодействуют с продуктами детонации. Предполагается, что в этой зоне с продуктами детонации реагируют до 20% парафина и тем самым изменяют параметры детонации; ещё 20% флегматизатора разлагается и реагирует с продуктами детонации за плоскостью Чепмена – Жуге. Установившегося мнения о подобной модели детонации флегматизированного ВВ нет. В [1] приводится ряд ссылок на работы, предполагающие значительное влияние динамической сжимаемости флегматизатора.

Для моделирования пористого ВВ применяется, например, широко распространённое полуэмпирическое уравнение состояния Джонса – Вилкинса – Ли

(JWL) с коэффициентами, подобранными для данной плотности ВВ; такие модели хорошо описывают детонацию ВВ, для которых уже известны коэффициенты уравнения состояния JWL [3-4]. В то же время проводится моделирование распространения детонации в мезоструктуре, заданной явно в виде областей ВВ и включений. Подобный подход позволит использовать одно уравнение состояния для ВВ стандартной плотности [5]. В то же время результаты обоих подходов не должны различаться. В настоящей работе расчеты проводились с достаточным уровнем пространственного разрешения распространения детонационной волны по ВВ, содержащему изолированные включения парафина или поры. Это позволило хорошо визуализировать двумерную гидродинамику и выявить основные эффекты, влияющие на распространение детонационной волны.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ И МЕТОД SPH

Для описания течения каждой компоненты гетерогенного материала используются уравнения сохранения массы, импульса и энергии

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \vec{U} \quad (1)$$

$$\rho \frac{d\vec{U}}{dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2)$$

$$\rho \frac{d}{dt} \left(E + \frac{1}{2} U^2 \right) = \nabla \cdot (\vec{U} \cdot \boldsymbol{\sigma}). \quad (3)$$

Для компонент среды, обладающих прочностью, компоненты тензора напряжений $\boldsymbol{\sigma}$ представлены в виде $\sigma^{\alpha\beta} = -P\delta^{\alpha\beta} + S^{\alpha\beta}$. Давление P определяется уравнением состояния, а компоненты девиатора напряжений $S^{\alpha\beta}$ – законом Гука. Уравнение состояния

для исходного непрореагировавшего ВВ, продуктов детонации, а также для инертных включений принимается в форме Ми – Грюнайзена:

$$P - P_r = \Gamma \rho (E - E_r),$$

здесь $P_r(\rho)$ и $E_r(\rho)$ – опорные кривые.

Для непрореагировавшего ВВ и инертных включений опорными кривыми являются ударные адиабаты при плотности выше начальной и упругие кривые при плотности ниже начальной

$$P_r = \begin{cases} P_H, \rho > \rho_0 \\ P_C, \rho \leq \rho_0 \end{cases}, \quad E_r = \begin{cases} E_H, \rho > \rho_0 \\ E_C, \rho \leq \rho_0 \end{cases}, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \text{где} \quad P_H &= C_a^2 (V_0 - V) / [V_0 - S_a (V_0 - V)]^2, \\ E_H &= P_H (V_0 - V) / 2, \\ P_C &= K (V_0 - V) / V_0, \\ E_C &= P_C (V_0 - V) / 2, \quad V = 1/\rho. \end{aligned} \quad (5)$$

Для продуктов детонации используется уравнение состояния Джонса – Вилкинса – Ли (JWL) [1], в котором опорными кривыми являются изэнтропы $P_r = P_S$, $E_r = E_S$, проходящие через точку Чепмена – Жуге:

$$P_S = A \exp\left(-\frac{R_1 \rho_0}{\rho}\right) + B \exp\left(-\frac{R_2 \rho_0}{\rho}\right) + C \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\Gamma+1}, \quad (6)$$

$$E_S = \frac{A}{R_1} \exp\left(-\frac{R_1 \rho_0}{\rho}\right) + \frac{B}{R_2} \exp\left(-\frac{R_2 \rho_0}{\rho}\right) + \frac{C}{\Gamma} \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\Gamma}.$$

Для решения уравнений (1)–(3) применялся модифицированный метод SPH, использующий решение задачи распада разрыва в расчете взаимодействия частиц. Особенности этой модификации метода изложены в [6]–[7]. Вычислительный алгоритм детально рассмотрен в [8].

SPH-аппроксимация уравнений (1)–(3) производится с помощью стандартной сглаживающей функции $W_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|/h)$, аргументом которой является безразмерная дистанция между базовой i -й частицей и окружающими j -ми частицами. Уравнения сохранения в SPH-форме имеют вид

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -2 \sum_j \frac{m_j \rho_i W'_{ij}}{\rho_j h} (\vec{U}_i^R - \vec{U}_{ij}^{*R}), \quad (7)$$

$$\frac{d\vec{U}_i}{dt} = -2 \sum_j \frac{m_j W'_{ij}}{\rho_i \rho_j h} \vec{\sigma}_{ij}^{*R}, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \frac{d(E_i + 0.5 U_i^2)}{dt} &= -2 \sum_j \frac{m_j W'_{ij}}{\rho_i \rho_j h} (\vec{U}_{ij}^* \cdot \vec{\sigma}_{ij}^{*R}), \\ \vec{R} &= (\vec{r}_j - \vec{r}_i) / |\vec{r}_j - \vec{r}_i|. \end{aligned} \quad (9)$$

В уравнениях (7)–(9), в правых частях, производится взвешенное посредством W_{ij} суммирование взаимодействия i -ой частицы с частицами окружения. Вычисление этих взаимодействий уточнено введением в схему SPH распадных значений скорости $\vec{U}_{ij}^{*R}$ и вектора напряжений $\vec{\sigma}_{ij}^{*R}$, определяемых решением задачи Римана.

Таким образом, автоматически осуществляются выполнение условий на контактных поверхностях между компонентами гетерогенной среды при сквозном счете течения.

Уравнения (7)–(9) решаются по явной разностной схеме. Текущий шаг по времени Δt определяется по критерию Куранта.

В данной модели применяется следующий алгоритм расчета фронта детонационной волны. Головная часть фронта рассчитывается с использованием уравнений состояния (4) и (5). На этом участке фронта идет адиабатическое нагружение нереагирующего исходного ВВ. При достижении некоторого порогового уровня сжатия, определяемого условием

$$\frac{V_0 - V}{V_0 - V_H} \geq \frac{1}{2}, \quad (10)$$

происходит переход от уравнений (4) и (5) к уравнениям (4) и (6), т.е. при заданном значении удельного объема происходит мгновенное разложение ВВ. При этом на следующем временном шаге в правую часть разностного уравнения энергии добавляется слагаемое $\rho_i Q / \Delta t$, содержащее удельную теплоту разложения ВВ Q . Далее эволюция продуктов детонации во фронте рассчитывается адиабатически.

3. АПРОБАЦИЯ МОДЕЛИ

Рассмотрим одномерную задачу о распространении детонационной волны в однокомпонентном однородном ВВ (тэне). Волна распространяется от жесткой стенки, расположенной при $x = 0$. Теплофизические свойства тэна, используемые в расчете, приведены в разделе 4 в таблице 2 [1]. Дополнительно в пороговом критерии (10) задается $\rho_H = 2440 \text{ кг/м}^3$.

Для сопоставления с численным расчетом используется автомодельное решение [9]. В автомодельном решении заданы показатель изэнтропии $k = 3$ и скорость детонационной волны $D = 8300 \text{ м/с}$.

На рис.1 представлены профили давления, плотности и скорости, рассчитанные по разработанному коду и по автомодельному решению. Расчётный и автомодельный профили давления хорошо накладываются друг на друга. Однако в расчетных профилях за фронтом детонационной волны имеется небольшой участок плато. В таблице 1 приведены значения параметров в точке Жуге, рассчитанные по коду, и значения этих параметров в автомодельном решении. Расчетные значения давления, плотности и скорости в точке Жуге несколько занижены. Это может быть связано с несовершенством алгоритма расчета фронта детонационной волны. В целом код удовлетворительно воспроизводит основные особенности автомодельного решения.

Таблица 1. Параметры детонационной волны

Параметры Чепмена – Жуге	Численное решение	Автомодельное решение
ρ_H	2280	2360
$P_H \times 10^{-9}$	27.0	30.48
$E_H \times 10^{-6}$	7.2	6.458
U_H	1800	2075
D	8240	8300

4. ДЕТОНАЦИЯ ТЭНА С ВКЛЮЧЕНИЯМИ ПАРАФИНА

Рассмотрим двумерную плоскую задачу о распространении детонационной волны в гетерогенном ВВ, состоящем из тэна ($C_5H_8(OHNO_2)_4$) с включениями парафина ($C_{19}H_{40}$ - $C_{35}H_{72}$). Будем считать, что детонация тэна описывается моделью, апробированной в предыдущем параграфе 3, а течение парафина – моделью инертной упругой среды.

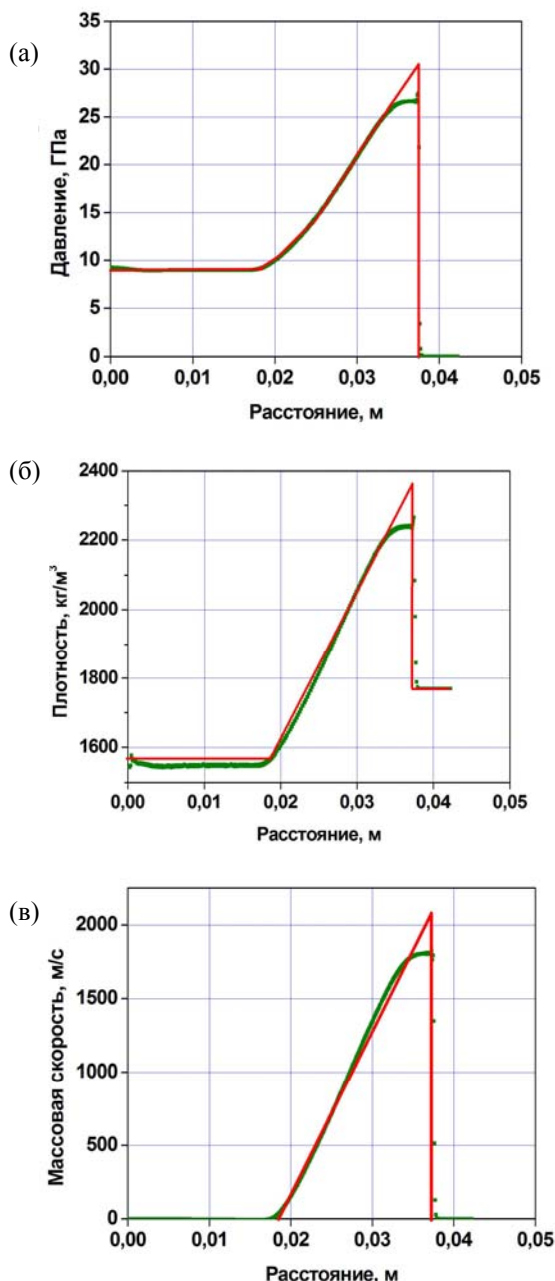


Рис.1. Рассчитанные (•) и автомодельные (•) профили давления (а), плотности (б) и скорости (в) продуктов детонации за фронтом ДВ

Теплофизические свойства и константы уравнения состояния компонент гетерогенного ВВ, используемые в расчетах, представлены в таблице 2 [1], [9]. Расчетная область представляет собой многосвязный прямоугольник, левая вертикальная и горизонтальная стенки которого считаются жесткими, а правая стенка – свободной. Размер расчетной области при разной степени дискретизации составлял: $x \times y = 32 \times 423$ (13536 SPH-частиц с $\Delta x = 1 \times 10^{-4}$ м каждая), $x \times y = 64 \times 400$ (25600 SPH-

частиц с $\Delta x = 0.5 \times 10^{-4}$ м каждая) и $x \times y = 128 \times 512$ (65536 SPH-частиц с $\Delta x = 0.25 \times 10^{-4}$ м каждая). Дискретизация расчетной области на SPH-частицы варьировалась, чтобы исключить в расчетах эффекты численных погрешностей.

Примеси парафина (и поры – в следующем параграфе 5) задавались регулярной по координате x цепочкой квадратных включений, причём включения располагались в шахматном порядке (что достигалось сдвигом каждого четного включения из линейной цепочки на $1/2$ периода по координате y).

Таблица 2. Теплофизические свойства и константы уравнения состояния компонент

Параметр	Парафин $C_{19}H_{40}$ - $C_{35}H_{72}$	Тэн $C_5H_8(OHNO_2)_4$
ρ	910	1770
$K \times 10^9$	0.73	6
C_a	3320	2830
S_a	1.24	1.910
$Q \times 10^6$	-	5.703
D	-	8300
$A \times 10^9$	-	614
$B \times 10^9$	-	16.926
R_1	-	4.4
R_2	-	1.2
Γ	0.146	0.25

На рис.2 желтым цветом выделена ячейка мезоструктуры, периодическое повторение которой вдоль осей x и y определяет структуру ВВ. Расчетная область делилась на квадраты $x \times y$ (их размеры приведены выше) и в каждый такой квадрат помещалось одно включение парафина размером 20×20 , 18×18 , 14×14 и 10×10 SPH-частиц (для $x \times y = 32 \times 423$), 40×40 , 36×36 , 28×28 и 20×20 SPH-частиц (для $x \times y = 64 \times 400$), 80×80 , 72×72 , 56×56 и 40×40 SPH-частиц (для $x \times y = 128 \times 512$).

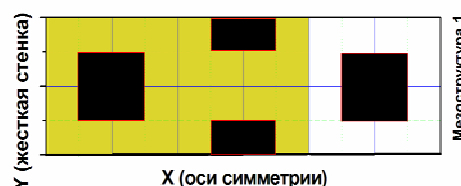
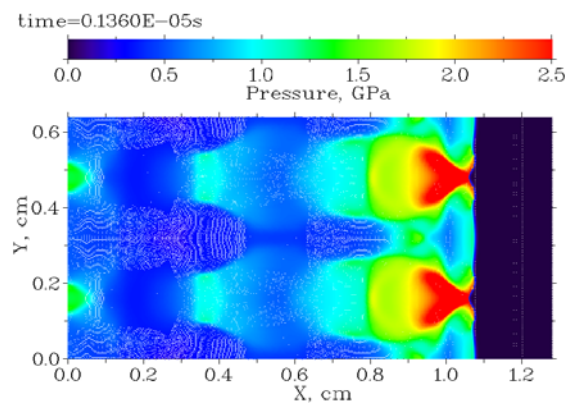
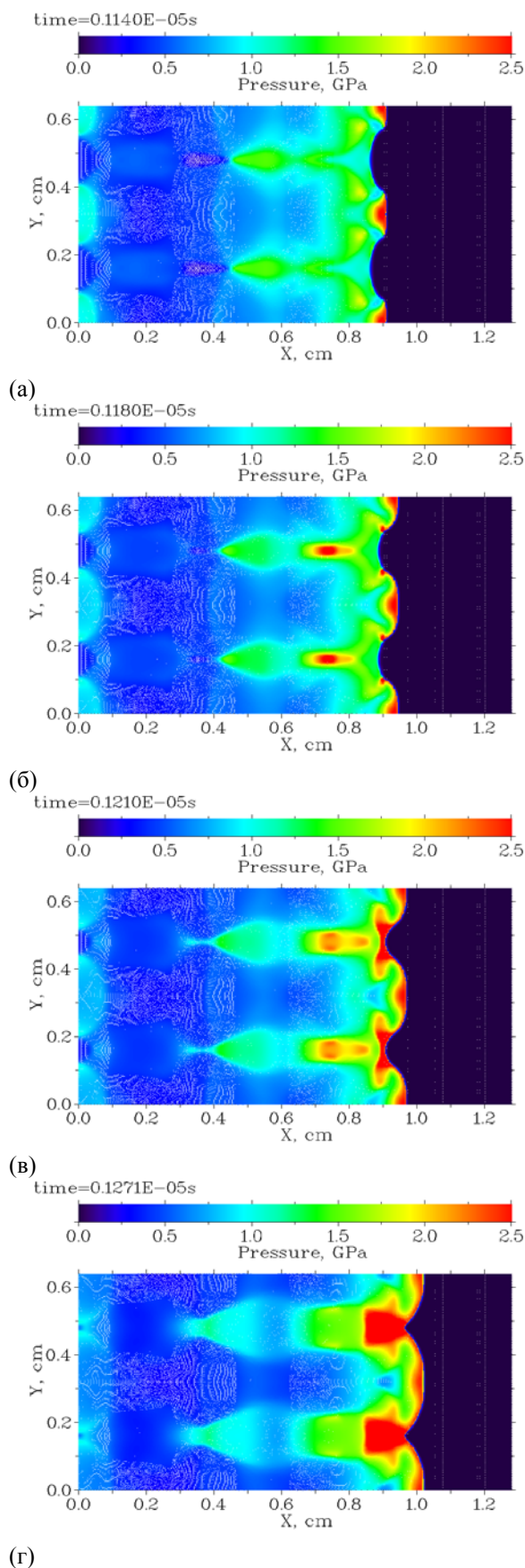


Рис.2. Ячейка тэн/парафин (жёлтый/чёрный цвета), образующая мезоструктуру ВВ с включениями.

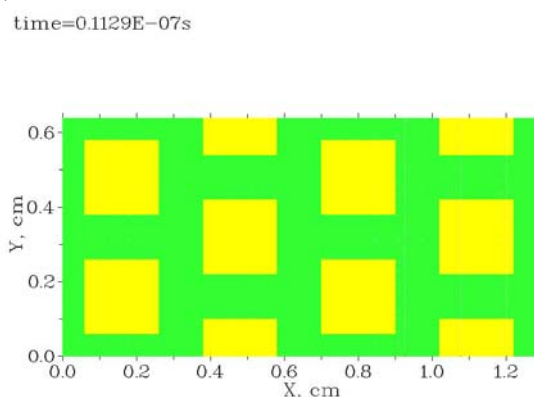
Предполагалось, что инициирование детонации осуществляется мгновенным разложением слоя ВВ, примыкающего к жесткой стенке ($x=0$). Этот слой ВВ протяженностью в 4 SPH-частицы (или $0.1 \div 0.4$ мм) в момент времени $t=0$ приобретал параметры изохорического разложения и являлся детонатором для остального ВВ расчетной области. Детонационная волна распространялась от жесткой стенки вправо.

Была проведена серия расчетов детонации смеси тэна с добавками включений парафина (при различных весовых долях ВВ в смеси ВВ/парафин) и для различного характера расположения включений парафина. В [1] приведены результаты экспериментов для смеси ВВ/парафин при массовых долях ВВ в 75; 80; 90; 95. Эти соотношения и были выбраны для моделирования.

На рис. 3 можно видеть расчетное распространение детонационной волны от жесткой стенки по составу E-25 (тэн/парафин 75/25). Приведенные на рис.3 кадры отображают динамику распространения детонационной волны, взаимодействие компонент ВВ и дифракцию детонационной волны на включениях.



(д)



(е)

Рис. 4. Поле давления в E-25 для моментов времени $t=1.14$ мкс (а), 1.18 мкс (б), 1.21 мкс (в), 1.27 мкс (г), 1.36 мкс (д) и мезоструктура ВВ в исходном состоянии при $t=0$ (е).

Рис.3а отвечает моменту выхода детонационной волны из центральной горизонтальной перегородки ВВ. Фронт детонационной волны плоский. Видна разгрузка детонационной волны в парафин. В парафине ударная волна сильно искривлена вследствие разницы скоростей распространения волн в компонентах.

На рис.3б показано начало развития дифракции детонационной волны при огибании угловой части включения. Видно продвижение фронта по вертикальной линии контактной поверхности компонент. Внутри компонент наблюдается сильное повышение давления.

На рис.3в показан момент столкновения встречных дифрагирующих детонационных волн.

Рис. 3г иллюстрирует выход детонационной волны на вертикальную контактную поверхность тэн-парафин. Видно также продвижение ударной волны в парафин.

На рис. 3д показано, как сплошной фронт детонационной волны снова распался на отдельные волны,двигающиеся по горизонтальным перегородкам, разделяющим включения парафина. После выхода детонационной волны из перегородки повторяется описанный выше цикл.

Расчетная скорость детонационной волны определялась по положениям её фронта в два различных момента времени. На рис. 4 показаны результаты расчёта скорости детонации для массовых долей ВВ/парафин 75/25; 80/20; 90/10; 95/5 (при различной мезоструктуре смеси) и сравнение этих расчётов с экспериментальными данными [1], [2].

При моделировании было обнаружено, что детонационная волна распространяется по мезоструктурам различных вариантов (при равном содержании парафина) с одинаковой скоростью независимо от степени дискретизации расчетной области (максимальное расхождение результатов при изменении дискретизации составило 130 м/с).

Завышенные значения расчётной скорости детонации относительно экспериментальных данных объясняется тем, что в модели детонации никак не учитывается химическое взаимодействие компонент смеси. На рис. 5 отражено влияние на скорость детонации эффекта дифракции, связанного с мезоструктурой ВВ и потерь энергии продуктов детонации на деформирование инертных включений.

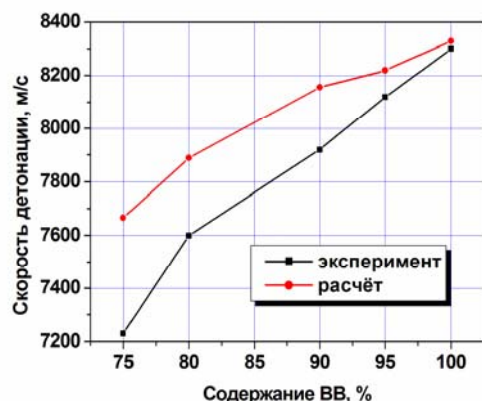


Рис. 5. Рассчитанные и экспериментальные скорости детонации тэна с различным содержанием парафина.

5. ДЕТОНАЦИЯ ПОРИСТОГО ВВ

В данном разделе моделируются процессы распространения детонационной волны в пористом ВВ. Конфигурация пористой мезоструктуры принимается такой же, как для гетерогенного ВВ предыдущего параграфа (см. рис. 2). Поля давления в детонирующем пористом ВВ представлены на рис. 6. Распространение детонационной волны в пористом ВВ аналогично описанному выше движению детонационной волны по флегматизированному ВВ, за исключением ряда отличий, обусловленных пористостью. Продукты детонации прорываются в пору и заполняют её (рис. 6а), не опережая при этом фронт детонационной волны, распространяющейся по горизонтальным перегородкам между порами. В момент выхода детонационной волны из горизонтальной перегородки (рис. 6б) пора заполнена расширяющимися продуктами детонации. При движении по вертикальной перегородке фронт расходящейся детонационной волны дифрагирует и принимает овальную форму (рис. 6в). Далее происходит столкновение встречных детонационных волн. На рис. 6г детонационная волна с вогнутым фронтом входит в следующий ряд перегородок с одновременным прорывом продуктов детонации в пору.

Движение детонационной волны в пористой мезоструктуре имеет ярко выраженный дифракционный характер, как и в гетерогенной смеси ВВ/флегматизатор. Были проведены расчеты при различных значениях пористости и получены значения скорости детонации, показанные на рис. 7 как функция плотности. Там же нанесены экспериментальные значения из [1] и [10] для тэна.

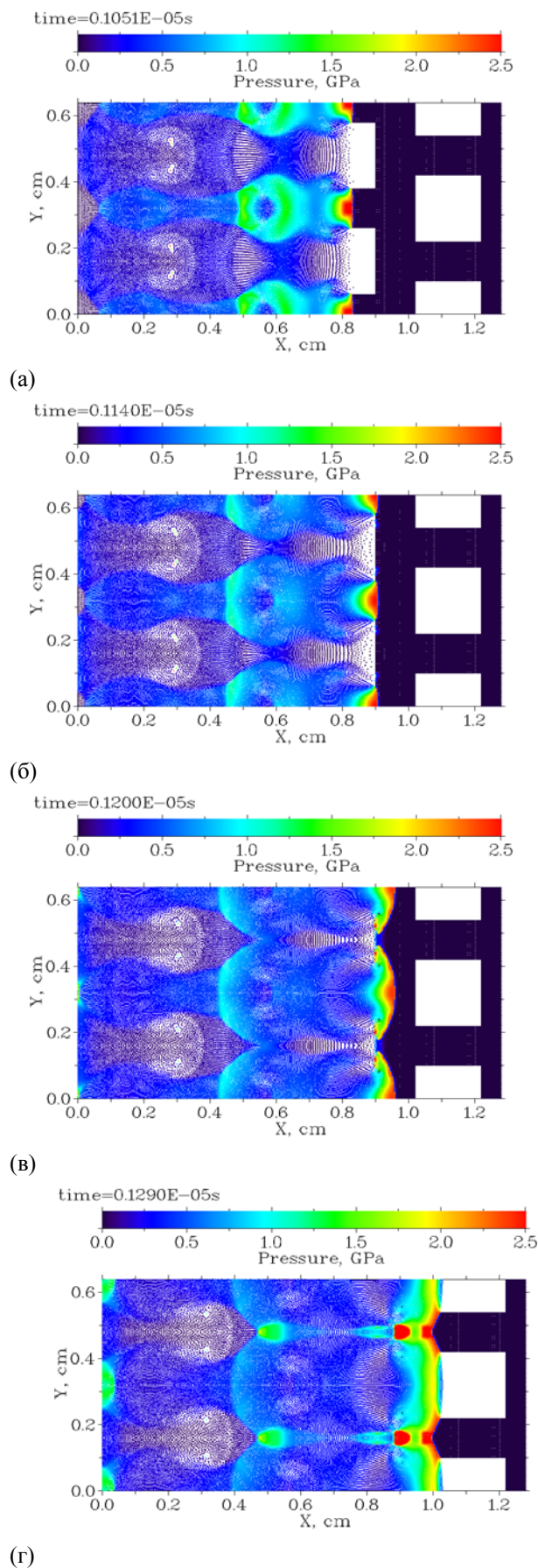


Рис. 6. Поле давления в пористом ВВ (тэне) для моментов времени $t=1.05$ мкс (а), $t=1.14$ мкс (б), $t=1.2$ мкс (в), $t=1.29$ мкс (г)

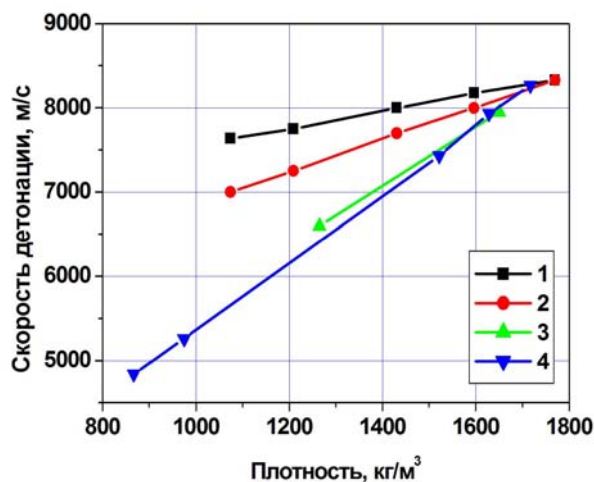


Рис. 7. Скорость детонации пористого ВВ (тэн) в зависимости от плотности (1 – расчет, 2 – расчет с неполным энерговыделением, 3 – эксперимент [1], 4 – эксперимент [10])

Расчет 1 был выполнен при условии, что при детонации выделяется полная энергия разложения ВВ Q . Кривая 1 демонстрирует влияние пористости на скорость детонационной волны. Для того, чтобы определить влияние неполноты разложения ВВ на скорость детонации в расчете было использовано уменьшенное вдвое значение теплоты разложения ВВ. Результаты представлены на кривой 2. Очевидно, что эффекты схлопывания пор и дифракционные эффекты (кривая 1) не могут объяснить причину столь значительного падения скорости детонации в рамках принятой модели детонации. Для достижения соответствия данных расчета и эксперимента необходимо совершенствование модели, в первую очередь с целью учета кинетики разложения ВВ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнено численное моделирование распространения детонационных волн в гетерогенных ВВ с явным выделением мезоструктуры материала. Для описания детонирования активной составляющей ВВ использована модель Чепмена – Жуге.

Выявлены основные особенности распространения фронта детонационной волны и течения продуктов детонации за фронтом. Для ВВ с инертными включениями получены двумерные распределения параметров, демонстрирующие дифракцию фронта детонационной волны, деформирование включений. Сравнение расчетных и экспериментальных значений скорости детонации обнаруживает качественное согласие данных.

Моделирование детонации пористых ВВ обнаруживает влияние эффекта схлопывания пор, дифракции фронта и неполноты разложения ВВ на скорость детонации. Однако для достижения удовлетворительного совпадения данных по скорости детонации при вариации пористости требуется усовершенствование математической модели с целью учета кинетики разложения ВВ.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

ВВ- взрывчатое вещество;
 σ – тензор напряжений, Н/м²;
 σ_{ij}^* – вектор напряжений в плоскости касания SPH-частиц i и j , определенный из решения задачи Римана [6], Н/м²;
 U_{ij}^* – массовая скорость в плоскости касания SPH-частиц i и j , определенная из решения задачи Римана [6], м/с;
 A, B, R_1, R_2, Γ – набор эмпирических констант для уравнения состояния JWL ;
 E – удельная внутренняя энергия вещества, Дж/кг;
 E_H – энергия на адиабате Гюгонио, Дж/кг;
 P_H – давление на адиабате Гюгонио, Н/м²;
 E_C – энергия на нулевой изотерме, Дж/кг;
 P_C – давление на нулевой изотерме, Н/м²;
 ρ – плотность вещества, кг/м³;
 D – скорость детонации ВВ, м/с;
 Q – теплота разложения ВВ, Дж/кг;
 K – модуль объемного сжатия, ГПа;
 C_a – коэффициент ударной адиабаты, м/с;
 S_a – коэффициент ударной адиабаты;
 W_{ij}' – производная сглаживающей функции для расчета взаимодействия SPH-частиц i и j ;
 h – дистанция сглаживания;
 m – масса SPH-частицы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Физика взрыва / Под ред. Л.П. Орленко // Т.1.М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. – 832с.
2. Ударные волны и экстремальные состояния вещества / Под ред. В.Е.Фортова и др // М. : Наука, 2000. – 425с.
3. N. Whitworth, Mathematical and Numerical Modelling of Shock Initiation in Heterogeneous Solid Explosives / Cranfield University, 2008. -245 p.
4. И.В. Кузьмицкий, О зависимости пространственно-временной структуры зоны химической реакции от начальной плотности взрывчатого вещества // Физика горения и взрыва. – 2004. Т.40, №4, С.106.
5. J. Lee, Detonation mechanisms in a condensed-phase porous explosive/ Universite de Sherbrooke, 1997. – 104 p.
6. A.N. Parshikov, Application of a Solution of the Riemann Problem to the SPH Method, *Comput. Math. Math. Phys. (English translation)* **39**, 1173 (1999).
7. A.N. Parshikov, S.A. Medin, I.I. Loukashenko, V.A.Milekhin, Improvements in SPH Method by means of Interparticle Contact Algorithm and Analysis of Perforation Tests at Moderate Projectile Velocities, *Int. J. Impact Eng.* **24**, 779 (2000).
8. A.N. Parshikov, S.A. Medin, Smoothed Particle Hydrodynamics Using Interparticle Contact Algorithms *J. Comput. Phys.* **180**, 358 (2002)
9. Л.П. Орленко, Физика взрыва и удара // М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 304с.
10. В.Ф. Куропатенко, Модели механики сплошных сред / Челябинск, Челяб. Гос. Ун-т, 2007. – 302с.