## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КУМУЛЯТИВНОГО ЭФФЕКТА В МИКРОКАНАЛЕ ВЗРЫВЧАТОГО ВЕЩЕСТВА

#### А.Н. Паршиков, И.М. Лозицкий

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

#### Аннотация

Проведено численное моделирование эффекта кумуляции продуктов взрыва в микроканале взрывчатого вещества (тэн) и моделирование передачи детонации кумулятивными струями, состоящими из продуктов взрыва. Получено согласие с экспериментами по вхождению детонационной волны в микроканал взрывчатого вещества. Для гидродинамических расчетов был использован метод SPH в плоской двумерной постановке.

## NUMERICAL MODELING OF THE CUMULATIVE EFFECT IN THE MICROCHANNEL OF THE EXPLOSIVE

Numerical modeling of the cumulative effect of the detonation products in the microchannel of the explosive (PETN) and numerical modeling of the detonation transfer with the cumulative jets consisting of the detonation products were made. The agreement with the detonation wave entering the microchannel experiment was achieved. For hydrodynamic calculations SPH method in plain two-dimensional approximation was used.

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Явление образования высокоскоростных струй газа при детонации пористого BB упоминается в литературе как «канальный эффект» [1]. Движение этих струй в порах BB опережает движение фронта ДВ по перемычкам между порами и предполагается, что струи продуктов взрыва могут инициировать детонацию BB при соударении с перемычками, находящимися на пути движения этих струй. Явление получило в [2] название «опережающей детонации». Впервые скорость распространения продуктов взрыва в микроканале BB определялась экспериментально в работе [3] и для BB с D = 7800 м/с (тэн) были зарегистрированы скорости до 15600 м/с. Из оценок [8] известно, что при выходе ДВ на свободную поверхность скорость истечения первой порции продуктов детонации с фронта ДВ составляет

$$U_B = \frac{3k-1}{k^2 - 1}D,$$
 (1)

но при дальнейшем расширении продуктов детонации их скорость достигает (для типичных BB) величины 12000м/с. Это ниже значений скорости, полученной в экспериментах [3] и авторы работы [3] объясняют свои результаты кумуляцией продуктов детонации в микроканале BB. Настоящая работа имеет своей целью:

- с помощью вычислительного эксперимента обосновать это предположение;
- в вычислительном эксперименте на примере модельного ВВ с прямоугольными порами воспроизвести явление, называемое «опережающей детонацией».

# 2. МОДЕЛЬ РАСЧЕТА ДЕТОНАЦИИ В КОНДЕНСИРОВАННОМ ВВ

В данной работе использовался гидродинамический код SPH в плоской двумерной постановке. Основные уравнения механики сплошной среды и алгоритм их решения методом SPH подробно изложены в [5], а в [6] приводится модификация алгоритма SPH для решения задач детонации. В принятой модели детонации предполагается наличие равновесия между ВВ и продуктами детонации (ПД) по давлению [7]:

$$P = P_s = P_g . (2)$$

При дискретизации расчетной области на SPHчастицы граница между горящим BB и его продуктами детонации не выделяется явно; горение BB происходит во всём объеме SPH-частицы и определяется массовой долей а непрореагировавшего BB. Для смеси из двух компонент (горящее BB и его ПД) внутренняя энергия SPH-частицы определяется из уравнения энергии при численном решении гидродинамической задачи [4]. Затем (согласно [7]) предполагается, что разница между этой энергией и суммой из двух внутренних энергий (внутренней энергии BB на адиабате и внутренней энергии ПД на изоэнтропе), распределяется между BB и ПД пропорционально энергиям на адиабате и изоэнтропе:

$$\frac{E_S - E_H}{E_g - E_i} = \frac{E_H}{E_i} \,. \tag{3}$$

Удельный объем и внутренняя энергия BB (индекс "s") и ПД (индекс "g") в смеси распределяются пропорционально их массовым долям:

$$V = \alpha V_s + (1 - \alpha) V_g , \qquad (4)$$

$$E = \alpha E_s + (1 - \alpha) E_g. \tag{5}$$

В уравнениях (2)-(5) принято

$$P_{s} = \begin{cases} P_{H} + \frac{\gamma_{s} \left( E_{s} - E_{H} \right)}{V_{s}} \\ \frac{K \left( V_{0} - V_{s} \right)}{V_{0}} + \frac{\gamma_{s} \left( E_{s} - E_{c} \right)}{V_{s}}, \end{cases}$$
(6)

$$P_{H} = \frac{C_{a}^{2} \left( V_{0} - V_{s} \right)}{\left[ V_{0} - S_{a} \left( V_{0} - V_{s} \right) \right]^{2}},$$
(7)

$$E_{H} = \frac{P_{H} \left( V_{0} - V_{s} \right)}{2}, \tag{8}$$

$$E_{c} = \frac{K(V_{0} - V_{s})^{2}}{2V_{0}},$$
(9)

$$P_g = P_i + \frac{\omega \left( E_g - E_i \right)}{V_\sigma} \,, \tag{10}$$

$$P_i = A \exp\left(-R_1 \frac{V_g}{V_0}\right) + B \exp\left(-R_2 \frac{V_g}{V_0}\right) + C\left(\frac{V_g}{V_0}\right)^{-(\omega+1)}, \quad (11)$$

$$E_{i} = \frac{AV_{0}}{R_{1}} \exp\left(-R_{1} \frac{V_{g}}{V_{0}}\right) + \frac{BV_{0}}{R_{2}} \exp\left(-R_{2} \frac{V_{g}}{V_{0}}\right) + \frac{CV_{0}}{\omega} \left(\frac{V_{g}}{V_{0}}\right)^{-\omega}.$$
 (12)

Уравнение (7) есть ударная адиабата непрореагировавшего ВВ, а уравнение (11) – изоэнтропа разгрузки ПД в форме JWL. Численные коэффициенты обоих уравнений для тэна приведены в [8] и в таблице 1. При расчете массовой доли *а* непрореагировавшего ВВ в принятой модели детонации можно использовать два уравнения: модель объемного горения Чепмена – Жуге

$$\dot{\alpha} = \frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{V_0 - V_{CJ}} \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} \tag{13}$$

или уравнение формальной макрокинетики (или УФМ, если следовать терминологии [8])

$$\dot{\alpha} = \frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}t} = -\alpha z \exp\left(-\frac{E^*}{E}\right). \tag{14}$$

Уравнения (12) или (13) позволяют определить изменение массовой доли непрореагировавшего BB от 1 до 0 ( $0 \le \alpha \le 1$ ), если из уравнения неразрывности

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\rho \left( \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} \right) \tag{15}$$

уже вычислен удельный объём  $V = 1/\rho$ , а из уравнения энергии

$$\rho \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left( E + \frac{1}{2} U^2 \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left( -PU_x \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( -PU_y \right) + Q_y \dot{\alpha} \qquad (16)$$

уже определена удельная внутренняя энергия *E*. Систему (2)–(16) замыкают уравнения сохранения импульса:

$$\rho \frac{\mathrm{d}U_x}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial P}{\partial x},\tag{17}$$

$$\rho \frac{\mathrm{d}U_y}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial P}{\partial y}.$$
(18)

Уравнения (15)–(18) решаются методом SPH [4]. Уравнение (13) представляет собой модель объемного горения Чепмена – Жуге [6], согласно которой горение начинается при  $V < V_0$  и завершается в точке Чепмена – Жуге (точка *CJ* на рис.1) при  $V = V_{CJ}$ . Гидродинамическая теория детонации предполагает, что горение ВВ происходит вдоль линии Михельсона (линия 3 на рис.1):

$$P = \left(D^2 / V_0^2\right) (V_0 - V)$$
(19)

и уравнение (13) не противоречит этому требованию. Но физически более реалистичной является известная модель детонации Зельдовича – Неймана – Дёринга, которая предполагает предварительное сжатие ВВ ударной волной до точки N пересечения линии Михельсона (линия 3) и ударной адиабаты непрореагировавшего ВВ (линия 4 на рис.1):

$$P = \frac{C_a^2 (V_0 - V)}{\left[V_0 - S_a (V_0 - V)\right]^2}.$$
 (20)

В точке N (при  $V = V_N$  и  $P = P_N$ ) происходит воспламенение BB и его последующее горение на участке N-CJ протекает согласно (14). Правее точки CJ расширение ПД происходит по изоэнтропе (11) (линия 5 на рис.1).



Рис.1. Процесс детонации тэна в плоскости *P-V*. Кривая 1 – расчёт по уравнению (14); кривая 2 – расчёт по уравнению (13); 3 – линия Михельсона; 4 – ударная адиабата BB; 5 – изоэнтропа ПД

Таким образом, модель (14) требует дополнительных условий для начала горения BB, т.е. для начала расчета по (14) необходимо знать величины  $P_N$  и  $V_N$ . Их можно определить из решения системы (19)–(20), полагая величину D заранее известной, как характеристику BB. Тогда

$$P_N = \frac{D^2}{V_0} \left( \frac{D - C_a}{DC_a} \right),\tag{21}$$

$$V_N = V_0 \left( 1 - \frac{D - C_a}{DS_a} \right). \tag{22}$$

Численный расчет взрывчатого превращения ВВ в SPH-частице при детонации тэна, вызванной ударом вольфрамовой пластины (скорость удара 3200 м/с), представлен на рис.1 в переменных *P-V*. Расчету по уравнению (14) соответствует кривая 1, а расчету по уравнению (13) – кривая 2. Результаты обоих расчетов не противоречат изложенным выше теоретическим представлениям, на основе которых построена описанная модель детонации (2)–(22). Уравнение (13) описывает процесс взрывчатого превращения BB как изменение массовой доли BB от 1 до 0 в диапазоне удельных объёмов  $V_0 \ge V \ge V_{CJ}$ , т.е. ниже точки Чепмена, а уравнение (14) описывает взрывчатое превращение BB как процесс, происходящий выше точки Чепмена – Жуге и в диапазоне  $V_N \le V \le V_{CJ}$  (рис.2).



Рис.2. Массовая доля ВВ при взрывчатом превращении тэна в детонационной волне. Кривая 1 – расчёт по уравнению (14); кривая 2 – расчёт по уравнению (13)

Несмотря на различный подход к описанию взрывчатого превращения BB, уравнения (13) и (14) дают близкие результаты при расчете распространения детонации. На рис. 3 показаны профили давления при детонации тэна на момент времени  $t = 4\mu s$ . Очевидно, что уравнение (14) точнее воспроизводит ширину зоны реакции (<0.5 мм, [7]) и сам профиль детонационной волны; наблюдается химический пик (точка N) и излом кривой 1 в точке Чепмена – Жуге. Но, если детальное воспроизведение профиля ДВ не является существенным для решаемой задачи с процессами детонации, то при моделировании приемлемы как уравнение (14), так и уравнение (13).



Рис.3. Профили давления на момент времени  $t = 4 \mu s$  при детонации ВВ (тэн), рассчитанные с помощью УФМ (кривая 1) и модели объёмного горения Чепмена – Жуге (кривая 2)

При расчете распространения детонационной волны по BB с микроканалом использовались оба уравнения и оба показали близкие результаты.

### 3. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ ПО ВЗРЫВЧАТОМУ ВЕЩЕСТВУ, СОДЕРЖАЩЕМУ МИКРОКАНАЛ

Решалась плоская двумерная задача о движении детонационной волны, инициированной ударом металлической пластины толщиной 0.6 мм (скорость удара составляла 3200м/с, пластина спустя 1 мкс после соударения принудительно останавливалась и на протяжении всей оставшейся стадии расчета скорости всех частиц www.chemphys.edu.ru/pdf/2011-02-01-019.pdf

пластины полагались равными нулю). Размер пластины составлял  $x \times y = 60 \times 120$  SPH-частиц с размерами  $\Delta x \times \Delta y = 10$  мкм ×10 мкм каждая. Детонационная волна перемещалась от поверхности соударения по прямоугольной области, заполненной BB и содержащей прямоугольную полость. Размер расчетной области, заполненной BB, составлял  $x \times y = 240 \times 120$  SPH-частиц, а полость в расчетной области была образована изъятием участка размером  $x \times y = 200 \times 20$  SPH-частиц. Необходимые для численного моделирования характеристики материалов приведены в таблице 1.

Описанная конфигурация расчетной области соответствует эксперименту [3] и схема которого показана на рис. 4. В экспериментах [3] использовалось ВВ с несколько меньшей скоростью детонации, нежели в выполненных расчетах. Это связано с тем, что набор констант уравнения JWL (см. таблицу) определён для тэна с D = 8300 м/с [8].

Таблица 1.

Параметр	Ед. изм.	Вольфрам, W	Тэн С <sub>5</sub> Н <sub>8</sub> (ОНО <sub>2</sub> ) <sub>4</sub>
$ ho_0$	кг/м <sup>3</sup>	19300	1770
$K \times 10^9$	$H/M^2$	300	6
$C_a$	м/с	4029	2830
$S_a$	_	1.237	1.910
$Q_v \times 10^6$	Дж/кг	_	5.703
D	м/с	_	8300
$P_{CJ} \times 10^{9}$	$H/M^2$	_	33.5
$V_{CJ} \times 10^{-4}$	м <sup>3</sup> /кг	_	4.098
$\gamma_s$	-	1.2	2.64
$A \times 10^9$	$H/M^2$	_	614
$B \times 10^9$	$H/M^2$	_	16.926
$R_1$	-	_	4.4
$R_2$	-	_	1.2
ω	_	_	0.25

#### Продукты детонации



Рис.4. Схема эксперимента [3]

В экспериментах [3] оптическим методом фиксировались моменты времени  $t_1$  (выход ДВ в микроканал) и  $t_2$  (удар ПД о торцевую поверхность световода); по известной глубине микроканала h определялась скорость ПД в микроканале. Вычислительный эксперимент соответствовал натурному и результаты показаны на рис. 5. Во всех расчетах микроканал полагался вакуумированным.



Рис.5. Результаты расчета (•) и экспериментов с воздухом в микроканале (+) и вакуумом в микроканале (\*)

В расчете скорость ПД в микроканале достигала значения 14000 м/с, что несколько ниже экспериментально зарегистрированной скорости (этот факт можно объяснить численным моделированием явления в плоской 2-D постановке). Чтобы обнаружить признаки эффекта кумуляции ПД в микроканале, обратимся к рис. 6, представляющем визуализацию течения в различные моменты времени и визуализацию массовой доли ВВ во всей расчетной области.

На рис. 7 представлена визуализация удельной энергии в расчетной области для тех же моментов времени. На рис. 6а-7а показан момент выхода детонационной волны в микроканал. Существенных изменений в распределении энергии нет и течение близко к одномерному. На рис. 6б-7б наблюдаются выбросы струй ПД из угловых областей микроканала; эти струи имеют большую плотность энергии, чем ПД при их начале истечения в микроканал. Образованная угловыми струями область ПД заполняет микроканал и имеет скорость в направлении оси канала порядка 10000 м/с. На рис. 6в-7в противоположные стенки микроканала смыкаются и наблюдается начало формирования струи ПД высокой плотности; скорость истечения ПД из зоны смыкания возрастает до 12000 м/с. В момент времени t = 0.2 мкс (рис. 6г–7г) устанавливается стационарная конфигурация течения в области смыкания стенок микроканала и скорость истечения ПД из этой области составляет 14000 м/с. Истекающие ПД имеют плотность энергии около 50 МДж/кг, что в несколько раз превышает плотность энергии при детонации. По мере истечения струя ПД расширяется и взаимодействует со стенками микроканала. Показанный на рис. 6-7 и описанный выше процесс является типичным процессом газовой кумуляции. Необходимо заметить, что наблюдаемый кумулятивный эффект воспроизводится в расчетах как при использовании уравнения (13), так и при использовании уравнения (14). Это означает, что на исследованном пространственном масштабе эффекты кумуляции ПД определяются гидродинамическими процессами при схлопывании микроканала и имеющиеся различия в профиле ДВ (рис. 3) вследствие различных моделей горения ВВ не сказываются на процессе кумуляции ПД в микроканале. При этом остаётся открытым вопрос о кумулятивных эффектах в микроканалах, размеры которых существенно меньше ширины зоны реакции (что является предметом дальнейших исследований).



Рис.6. Визуализация течения ПД в микроканале BB и распределение массовой доли BB в моменты времени t = 0.05; 0.07; 0.125 и 0.21мкс



г)

Рис.7. Визуализация течения ПД в микроканале ВВ и распределение удельной энергии ПД в моменты времени t = 0.05; 0.07; 0.125 и 0.21мкс

#### 4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯВЛЕНИЯ ОПЕРЕЖАЮЩЕЙ ДЕТОНАЦИИ

Представляет интерес рассмотреть возможность поддержания детонации кумулятивными струями ПД, формируемыми в микроканалах ВВ. Моделирования процесса опережающей детонации рассматривалось на примере ВВ с прямоугольными порами, расположенными в шахматном порядке. Детонационная волна инициировалась ударом вольфрамовой пластины со скоростью 3200 м/с (рис.8). На рис. 8а показан момент удара кумулятивной струи о вертикальную перемычку ВВ после прохождения струей ПД канала. Головная часть струи опережает фронт ДВ, распространяющийся по горизонтальной перемычке. Кумулятивные струи инициируют BB и в вертикальной перемычке формируется ДВ (рис. 8б). Сформированная ДВ распространяется через перемычку и формирует струю ПД в следующем канале (рис. 8г); эта струя ПД, пройдя канал, инициирует следующую перемычку ВВ, повторяя описанный цикл.



time=0.3000E-06s



г)

Рис.8. Процесс опережающей детонации в пористом BB (тэн)

В данном расчете была получена скорость передачи детонации 9600 м/с при средней плотности пористого ВВ 1309 кг/м<sup>3</sup>.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В вычислительном эксперименте был подтверждён вывод авторов работы [3] о наличии явления кумуляции ПД в микроканале ВВ и на примере модельного ВВ рассмотрен процесс опережающей детонации.

### СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

УФМ – уравнение формальной макрокинетики

- ВВ взрывчатое вещество
- ДВ детонационная волна
- ПД продукты детонации
- $A, B, R_1, R_2, \omega$  набор эмпирических констант для уравнения состояния JWL [8]
- Е удельная внутренняя энергия вещества, Дж/кг
- *Е<sub>Н</sub>* энергия на адиабате Гюгонио, Дж/кг
- $P_H$  давление на адиабате Гюгонио, Н/м<sup>2</sup>
- Е<sub>С</sub>- энергия на нулевой изотерме, Дж/кг
- *E<sub>i</sub>* энергия на изоэнтропе JWL, Дж/кг
- $P_i$  давление на изоэнтропе JWL, H/м<sup>2</sup>
- $\rho$  плотность вещества, кг/м<sup>3</sup>
- *V*-удельный объем вещества, м<sup>3</sup>/кг
- $P_{CJ}$  –давление в точке Жуге,  $H/M^2$
- *V*<sub>CI</sub> –удельный объём в точке Жуге, кг/м<sup>3</sup>
- *D* скорость детонации BB, м/с
- *k* показатель изоэнтропы ПД
- *α* массовая доля непрореагировавшего BB
- *Q<sub>v</sub>* теплота взрыва, Дж/кг
- γ<sub>s</sub> коэффициент Грюнайзена
- К модуль объемного сжатия, ГПа
- Са коэффициент ударной адиабаты, м/с
- S<sub>a</sub> коэффициент ударной адиабаты

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Дубнов А.В., Хотина Л.Д. О механизме канального эффекта при детонации конденсированных ВВ // Физика горения и взрыва. №4. 1966.С.352.
- 2. Woodhead D.W. Advance detonation in a tubular charge of explosive // Nature.1959. V.183.N 4677. P.1756–1757.
- Тарасов М.Д., Толшмяков А.И., Петушков В.С., Судовцов В.А., Тараканов М.Ю. Кумулятивные струи в микроканалах взрывчатого вещества //Физика горения и взрыва. Т.35. №3. 1999. С.140–142.
- 4. Станюкович К.П., Неустановившиеся движения сплошной среды // М.: Наука. 1971. 856 с.
- Parshikov A.N., Medin S.A., Smoothed Particle Hydrodynamics Using Interparticle Contact Algorithms J. Comput. Phys.2002. 180. P.358–382.
- Медин С.А., Паршиков А.Н., Моделирование мезоструктуры течения при распространении детонации в гетерогенных ВВ // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. Т.9. 2010. <u>http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-008.pdf</u>.
- Мейдер Ч. Численное моделирование детонации. М.: Мир. 1985. 384 с.
- 8. Физика взрыва / Под ред. Л.П. Орленко // Т.1.М.: ФИЗМАТЛИТ. 2002. 832с.