

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ JWL И МАКРОКИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ РАЗЛОЖЕНИЯ ВВ В МЕТОДЕ SPH

С.А. Медин, А.Н. Паршиков

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

Аннотация

С помощью метода SPH проведено численное моделирование мезоструктуры течения в детонационной волне, распространяющейся в пористом взрывчатом веществе PETN (тэн). Задача решалась в плоской двумерной постановке. Для конденсированного состояния и продуктов детонации использовались известные уравнения состояния JWL с константами, взятыми для ВВ нормальной плотности. Разложение ВВ моделировалось с помощью макрокинетического уравнения, согласованного с уравнениями состояния JWL. Установлено, что структура течения в детонационной волне существенно зависит от масштаба пор. При сопоставимых размерах пор и зоны разложения ВВ наблюдается инициация детонации в горячих пятнах, образующихся на поверхности поры при ударе кумулятивной струи. Получено хорошее согласование данных по зависимости скорости детонационной волны от средней плотности в пористом теле, полученных в двумерных расчетах, с данными экспериментов, а также расчетов по модели Зельдовича – Неймана – Деринга с различными начальными плотностями.

METHOD SPH WITH JWL EQUATIONS OF STATE AND MACROKINETIC REACTION RATE EQUATION FOR EXPLOSIVE DETONATION

S.A. Medin, A.N. Parshikov

Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences, Russia, Moscow, 125412

Computer simulation of flow mesostructure of detonation wave propagating in the porous high explosive PETN is performed by means of modified SPH method. The problem was solved for the plane two-dimensional formulation. The standard JWL equations of state for unreacted explosive and detonation products, the constants of whose were taken for the normal density, were used. The explosive burn was described by the macrokinetic reaction rate equation consistent with the JWL equations of state. It was found out that that the flow structure in detonation wave essentially depends on the pore scale. When the pore dimension is comparable with the burn zone width the detonation is initiated in hot spots arised at the pore surface under cumulative jet impact. Good agreement is achieved for the dependence of the detonation wave velocity on the mean explosive density obtained in two-dimensional computation with experimental data as well as with ZND theory supplied by the JWL equations of state for various initial densities.

1. ВВЕДЕНИЕ

При изучении детонации неоднородных ВВ (в частности – пористых и гранулированных) накоплен и обобщён значительный экспериментальный материал [1]. Получены эмпирические зависимости параметров детонации от плотности и состава ВВ, пригодные для большинства инженерных приложений. Для численного моделирования детонации гетерогенных ВВ разработаны многоскоростные (многожидкостные) модели [2-5], теоретические основы которых хорошо развиты [6]. Но в последнее время возрос интерес к изучению явления детонации на мезомасштабе ВВ [7,8], что связано с необходимостью интерпретации экспериментов по детонации смесевых, насыпных, пористых, флегматизированных, агатированных и содержащих тяжёлые инертные добавки взрывчатых веществ [9].

В данной работе представлены результаты численного моделирования детонации пористого взрывчатого вещества PETN (тэн). Различная величина исходной макрокопической плотности обеспечивалась неоднородностью среды на её мезомасштабе, а именно: структура ВВ задавалась как набор вакуумированных пустот, пространство между которыми полагалось заполненным взрывчатым веществом нормальной (1750 кг/м^3) плотности. Таким образом, меняя размер и кон-

центрацию пор, можно обеспечить произвольную макрокопическую плотность образца ВВ, подлежащего численному моделированию. Пространственный масштаб моделирования ВВ учитывал структурные неоднородности порядка $10^{-4} \div 10^{-5} \text{ м}$.

При численном моделировании процесса детонации пористого взрывчатого вещества из среды выделяется расчетная область, которая разбивается на SPH-частицы, содержащие ВВ и не обязательно равные по массе. При таком алгоритме заполнения расчетной области SPH-частицами все поры во взрывчатом веществе формируются естественным образом как пустые подобласти, в которых SPH-частицы отсутствуют. Форму и количество пор необходимо задавать на этапе подготовки исходных данных, исходя из представлений о мезоструктуре пористого ВВ. Допускается наличие трёх типов SPH-частиц: содержащие ВВ частицы, содержащие продукты детонации и «смешанные» частицы, содержащие ВВ и ПД. В последнем случае обе фазы перемешаны по всему объёму SPH-частицы и находятся в равновесии по давлению, скорости и температуре. Для расчета разложения ВВ к «смешанным» SPH-частицам применимы макрокинетические уравнения горения и уравнения состояния, позволяющие корректно описать обе фазы.

Для расчета параметров ВВ и ПД было выбрано уравнение состояния JWL и макрокинетическое уравнение горения ВВ [10–11]. Оба уравнения были использованы в коде SPH [12–13] и взрывчатое вещество полагалось средой с нулевой прочностью.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА ДЕТОНАЦИИ

Течение среды описывается уравнениями сохранения массы, импульса и энергии

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

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

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

SPH-аппроксимация уравнений (1)–(3) исчерпывающе изложена в [12–13]. Выполнение условий на контактных и свободных поверхностях осуществляется автоматически при сквозном расчете течения. Уравнения SPH решаются по явной разностной схеме. Для определения давления P используется уравнения состояния JWL [11]. Для непрореагировавшего ВВ и продуктов детонации имеем калорические уравнения состояния,

$$\frac{E_s}{v_{s0}} = \frac{P_s \tilde{v}_s}{\omega_s} - F_s(\tilde{v}_s) + F_s(1), \quad (4)$$

$$\frac{E_g}{v_{g0}} = \frac{P_g \tilde{v}_g}{\omega_g} - F_g(\tilde{v}_g) - Q, \quad (5)$$

термические уравнения состояния

$$P_s = \omega_s \tilde{v}_s [C_s T_s + G_s(\tilde{v}_s) + F_s(\tilde{v}_s)], \quad (6)$$

$$P_g = \omega_g \tilde{v}_g [C_g T_g + G_g(\tilde{v}_g) + F_g(\tilde{v}_g)], \quad (7)$$

аддитивные соотношения для внутренней энергии и удельного объема смеси

$$v = (1 - \lambda)v_s + \lambda v_g, \quad (8)$$

$$E = (1 - \lambda)E_s + \lambda E_g, \quad (9)$$

и условия термодинамического равновесия

$$P_s = P_g = P, \quad (10)$$

$$T_s = T_g = T \quad (11)$$

В уравнениях (4)–(7) введены следующие функции:

$$F_i(\tilde{v}_i) = A_i \left(\frac{\tilde{v}_i - 1}{\omega_i R_{1i}} \right) e^{-R_{1i} \tilde{v}_i} + B_i \left(\frac{\tilde{v}_i - 1}{\omega_i R_{2i}} \right) e^{-R_{2i} \tilde{v}_i},$$

$$G_i(\tilde{v}_i) = \frac{A_i}{R_{1i}} e^{-R_{1i} \tilde{v}_i} + \frac{B_i}{R_{2i}} e^{-R_{2i} \tilde{v}_i},$$

где $\tilde{v}_i = v_i/v_{i0}$, $i = s, g$

Нижний индекс принимает значения $i = s, g$ для конденсированной и газообразной фазы соответствен-

но. При задании λ, v, E неизвестными величинами в уравнениях (4)–(11) являются:

$$v_s, v_g, T_s, T_g, P_s, P_g, E_s, E_g.$$

В табл.1 даны константы уравнения JWL для PETN (тэн). Решение системы (4)–(11) в работе [10] производится методом простой итерации в безразмерных переменных и критерием сходимости является достижение невязки в 10^{-8} при соблюдении ряда рекомендаций о горении в волне разрежения, если ДВ выходит на свободную поверхность и ПД истекают в пустоту.

Таблица 1

Константы УРС JWL для PETN

Параметр	Продукты детонации, индекс (g)	Непрореагировавшее ВВ, индекс (s)
ρ_{s0} , кг/м ³	–	1750
C , МПа/°К	1.0	2.263
Q , ГПа	10.1	–
A , ГПа	617	3756
B , ГПа	16.926	–131.3
R_1 ,	4.4	7.2
R_2 ,	1.2	3.6
ω	0.25	1.173

В предлагаемой работе система (4)–(11) решается в размерных переменных методом дихотомии на интервале $0.5v_N < v_i < 1.5v_{CJ}$, при этом итерируется удельный объем ВВ v_s или удельный объем ПД v_g с использованием соотношения (8). Поиск решения не вызывал трудностей при выходе детонационной волны на свободную поверхность поры. Макрокинетическое уравнение для массовой доли продуктов детонации λ , образующихся при химических реакциях, также заимствовано из [11]:

$$\frac{d\lambda}{dt} = I(1-\lambda)^{2/9} \left(\frac{v_{0s}-1}{v_s} \right)^4 + J(1-\lambda)^{2/9} \lambda^{2/3} P^Z, \quad (12)$$

с константами для PETN (тэн) $I = 20 \text{ мкс}^{-1}$, $J = 400 \text{ мкс}^{-1} \text{ Мбар}^{-Z}$, $Z = 1.4$.

3. ТЕСТИРОВАНИЕ МЕТОДА SPH

Проведем сначала расчеты детонационной волны по модели Зельдовича – Неймана – Дёринга (ЗНД). Определим параметры в точках Чепмена – Жуге и Неймана для монолитного ВВ. Параметры в точке Чепмена – Жуге определяются при $\lambda = 1$ в результате решения уравнений сохранения и уравнений (5) и (7). Для этого сначала строим адиабату продуктов детонации

$$P \left\{ \left(\frac{2 + \omega_g}{2\omega_g} \right) \frac{v_g}{v_{s0}} - \frac{1}{2} \right\} - F \left(\frac{v_g}{v_{s0}} \right) = Q \quad (13)$$

Затем из условия касания линии Релея к адиабате (13) определяем параметры в точке Чепмена – Жуге и скорость детонационной волны D . Условие пересечения линии Релея с адиабатой непрореагировавшего ВВ

$$P \left\{ \left(\frac{2 + \omega_s}{2\omega_s} \right) \frac{v_s}{v_{s0}} - \frac{1}{2} \right\} + F_s(1) - F_s \left(\frac{v_s}{v_{s0}} \right) = 0 \quad (14)$$

позволяет получить параметры в точке Неймана. В табл. 2 представлены результаты расчета параметров детонационной волны, произведенных по модели ЗНД в [11] и в данной статье, а также в одномерных расчетах по методу SPH. Для тестирования кода SPH в одномерном приближении решалась задача удара пластины ВВ о жесткую стенку. Толщина пластины составляла величину 10 мм, а скорость удара 1600 м/с. С момента удара пластины о жесткую стенку процессы ударного сжатия, разложение ВВ и расширение продуктов детонации в волне Тейлора рассчитывались сквозным образом. На рис.1 представлена термодинамическая диаграмма указанных стадий течения.

Таблица 2

Параметры детонационной волны

Параметр	Из [11]	ЗНД модель	SPH (1D)
D , м/с	8210	8348	8450
U_{CJ} , м/с	2280	2294	2609
P_{CJ} , ГПа	33.5	33.51	33.52
v_{CJ}/v_{s0}	0.7253	0.7252	0.7295
P_N , ГПа	45.2	48.89	47.43
v_N/v_{s0}	0.6068	0.5992	0.6147
U_N , м/с	3188	3345.5	3661

Линиями с символами (■) представлены ударная адиабата непрореагировавшего ВВ, зона горения и изоэнтропа расширения продуктов детонации. Здесь же показаны сплошными линиями ударные адиабаты непрореагировавшего ВВ (14), продуктов детонации (13) и линия Релея, рассчитанные по модели ЗНД.

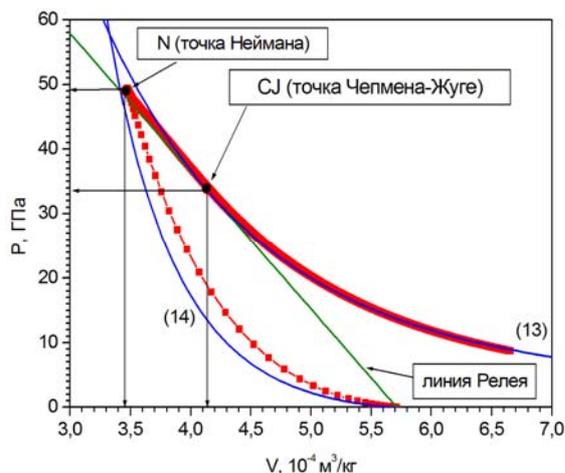


Рис.1. Ударная адиабата продуктов детонации (13), ударная адиабата ВВ (14), линия Релея и одномерный расчет методом SPH (■-■)

Формирование и распространение детонационной волны в установившемся режиме представлены на рис.2. В установившемся режиме четко выделяется химик, зона горения и волна Тейлора. Ширина зоны горения в установившемся режиме составляет величину в 120 мкм.

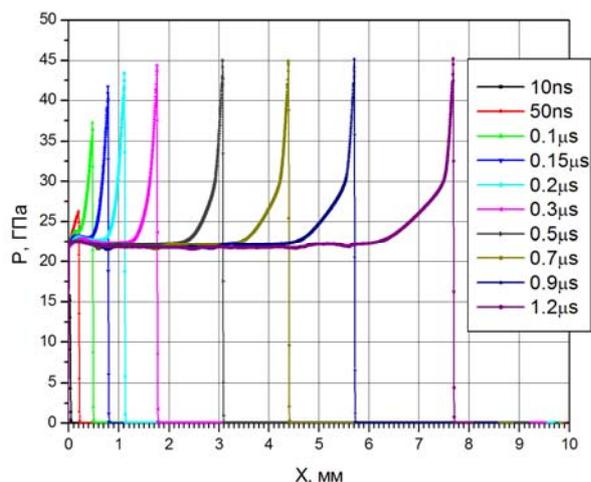


Рис.2. Выход на стационарный режим детонационной волны при ударе образца ВВ (тэн) о жесткую стенку. Расчет методом SPH в одномерном приближении. Скорость удара 1600 м/с

4. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ О ДЕТОНАЦИИ ПОРИСТОГО ВВ

Решалась плоская двумерная задача о движении детонационной волны от жесткой стенки по прямоугольной области, заполненной ВВ и содержащей вакуумные пустоты. Верхняя и нижняя границы области являлись жесткими стенками. Инициирование детонации осуществляется ударом по левой границе ВВ пластиной из вольфрама со скоростью 1600 м/с. SPH-частицам пластины через некоторое время после удара (обычно это время составляло в расчете 0.05 мкс) приписывалась скорость, равная нулю. Расчетная область, вертикальный период которой представлен на рис.3, составляла $x \times y = 1000 \times 40d^2$ (где d – диаметр SPH-частицы), а толщина пластины равнялась $50d$. В расчетной области располагалось от 10000 до 20000 SPH-частиц. Изменение средней плотности ВВ при таком задании расчетной области осуществляется изменением диаметра пор. Детонационная волна распространялась вправо.

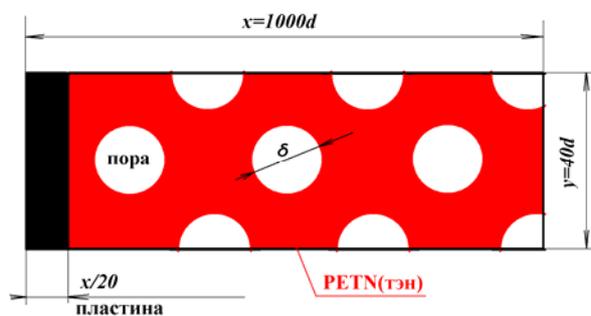


Рис.3. Расчетная область

Поры моделировались регулярной по координате X цепочкой окружностей. Располагались поры в шахматном порядке, что достигалось сдвигом каждой четной (по координате Y) цепочки пор на 1/2 периода по координате X. В расчетах изменялся размер пор δ .

5. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ ПОРИСТОГО ВВ

Рассмотрено распространение детонационной волны в пористой мезоструктуре при изменении диаметра поры при одинаковой средней плотности. На рис.4 и рис. 5 представлены картины одного цикла движения детонационной волны для двух диаметров пор, 1мм и 0.1мм, при средней плотности ВВ 1006 кг/м³.

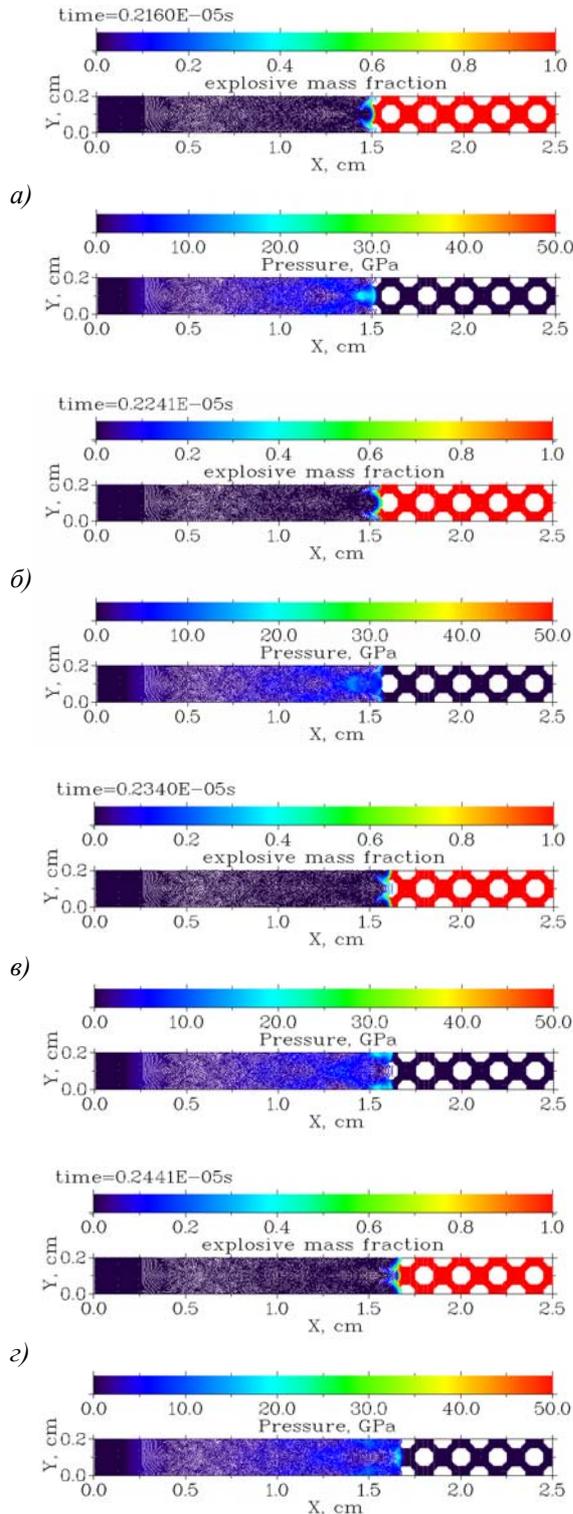


Рис. 4. Процесс движения детонационной волны по взрывчатому веществу (тэн) с начальной плотностью $\rho_0 = 1006 \text{ кг/м}^3$. Размер пор $\delta = 1 \text{ мм}$

Движение детонационной волны при большом размере пор (рис.4) имеет преимущественно дифракционный характер: детонационная волна перемещается по вертикальным перемычкам (рис.4, а). При выходе фронта детонационной волны на поверхность поры наблюдается кумулятивное истечение продуктов детонации в пору (рис.4, б, в), в то время как фронт детонационной волны распространяется по горизонтальным перемычкам.

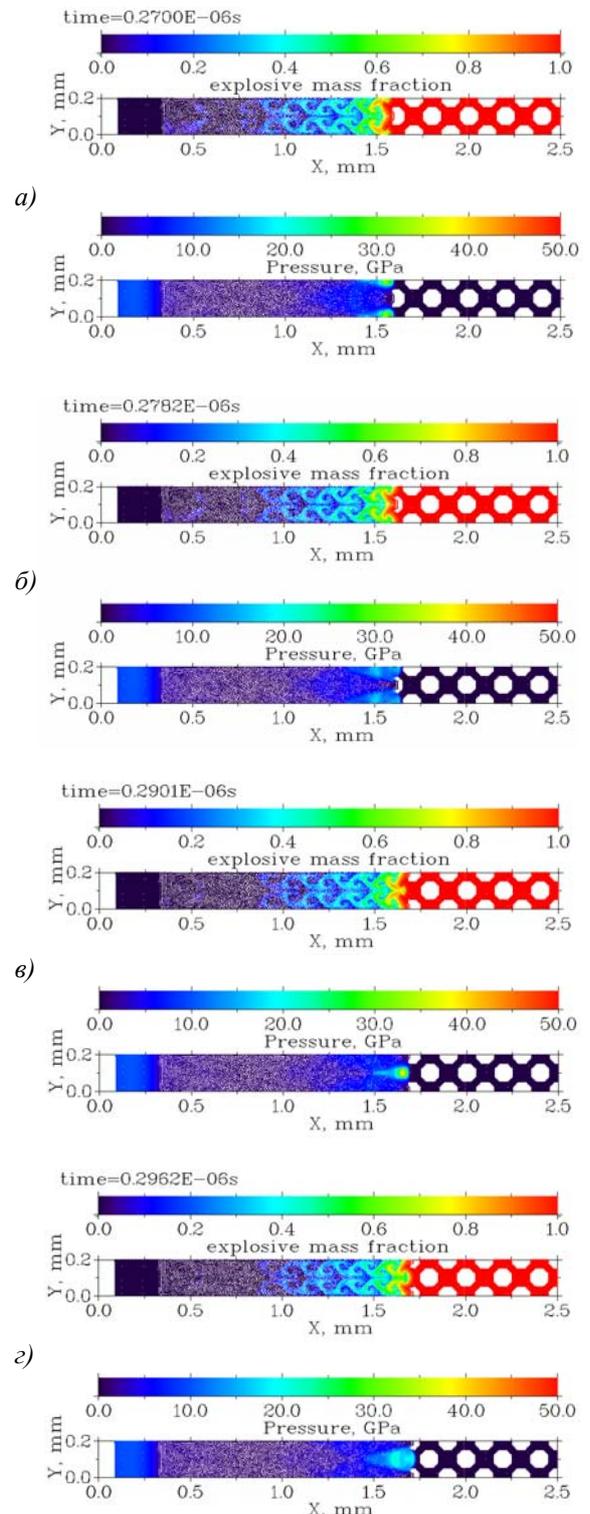


Рис. 5. Процесс движения детонационной волны по взрывчатому веществу (тэн) с начальной плотностью $\rho_0 = 1006 \text{ кг/м}^3$. Размер пор $\delta = 0.1 \text{ мм}$

Далее происходит встреча фронтов, исходящих из горизонтальных перемычек и струи продуктов детонации, ударяющей в вертикальную перемычку (рис.4, з). Цикл завершается схлопыванием поры и выходом детонационной волны на поверхность следующей поры.

Уменьшение диаметра пор на порядок (при неизменности структуры их расположения) не меняет начальной плотности ВВ, но характер распространения детонационной волны становится иначе. В этом случае размер диаметра поры становится сопоставимым с шириной зоны реакции (при нормальной плотности). На рис. 5, а показано начало схлопывания поры. Четкого фронта детонационной волны в перемычке не наблюдается. Прорыв в пору продуктов детонации отсутствует и потому пора во взрывчатом веществе (рис.5, б) деформируется и схлопывается, подобно схлопыванию пор в инертном материале. Такое схлопывание поры приводит к большему росту давления, нежели в предыдущем случае (при диаметре пор в 1мм). При ударе струи о противоположную стенку поры наблюдается возникновение «горячего пятна» и начинается разложение ВВ в нём (рис.5, в).

Горение ВВ распространяется в вертикальные перемычки (рис. 5, з) и описанный процесс повторяется. Структура зоны течения продуктов детонации за фронтом волны в этом случае имеет ярко выраженный вихревой характер. При этом горение ВВ затягивается и наблюдается увеличение эффективной ширины зоны реакции.

Приведенные на рис.4–5 иллюстрации распространения детонационной волны в пористом ВВ хорошо согласуются с современными представлениями о механизме поддержания детонации путем возникновения «горячих» пятен [15]. Впервые численное подтверждение механизму развития детонации в «горячих» пятнах было дано Ч. Мейдером на примере 3-D моделирования детонации в нитрометане, содержащем кубические полости [16]. Но сама идея о том, что самораспространяющая детонация возможна лишь при возникновении во взрывчатом веществе центров локализации энергии, высказана и обоснована Ю.Б. Харитоновым в [17].

Для определения зависимости скорости детонации PETN (тэн) от средней плотности были проведены расчеты для ВВ с размерами пор $\delta = 0.1$ мм, $\delta = 0.4$ мм и $\delta = 1$ мм при неизменной расчетной области. Результаты расчетов представлены на рис.6. Там же нанесены экспериментальные значения из [1] и [14] для ВВ (тэн).

В работе [9] приведена эмпирическая зависимость скорости детонации от плотности ВВ (тэн), полученная обработкой большого числа опытов:

$$D = \begin{cases} 4780 + 3.7(\rho_0 - 800), & \rho_0 < 1650 \\ 7920 + 3.05(\rho_0 - 1650), & \rho_0 > 1650 \end{cases} \quad (15)$$

Из рис. 6 можно видеть, что результат двумерного моделирования по коду SPH (расчет при диаметре пор 0.4 мм) практически совпадает с (15) и другими экспериментальными данными.

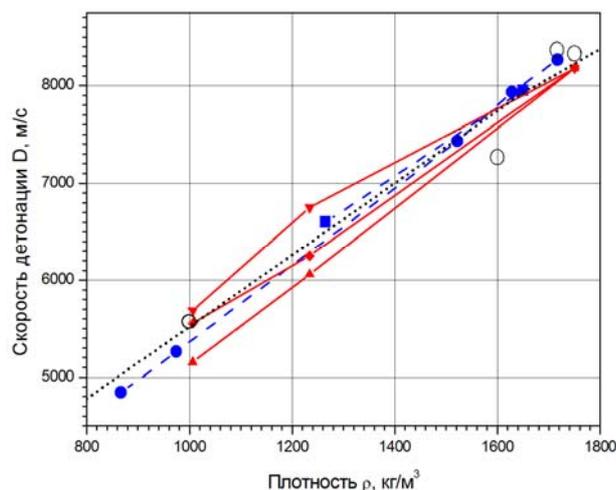


Рис. 6. Скорость детонации пористого PETN (тэн) в зависимости от плотности ВВ; \circ – расчет по модели ЗНД с константами JWL из [11], \triangle – расчет SPH для пор диаметром 0.1мм, \blacklozenge – расчет SPH для пор диаметром 0.4мм, \blacktriangledown – расчет SPH для пор диаметром 1мм, \bullet – эксперимент [14], \blacksquare – эксперимент [1], \cdots – расчет по соотношению (15).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработан двумерный нестационарный код для моделирования распространения детонационных волн в гетерогенных взрывчатых веществах. Для аппроксимации дифференциальных уравнений течения используется разработанная авторами модификация метода SPH. Осуществлено усовершенствование математической модели с помощью алгоритмов расчета термодинамических свойств по уравнениям состояния JWL и процесса разложения взрывчатых веществ по согласованным макрокинетическим уравнениям. проведено численное моделирование мезоструктуры течения в детонационной волне, распространяющейся в пористом взрывчатом веществе PETN (тэн). Задача решалась в плоской двумерной постановке с явным выделением пор в расчетной области. Проведено численное моделирование мезоструктуры течения в детонационной волне, распространяющейся в пористом взрывчатом веществе PETN (тэн). Проведен анализ эволюции структуры течения при распространении детонационной волны по пористой среде в зависимости от размера пор при одинаковой средней плотности. При достаточно большом размере пор распространение детонационной волны определяется ее дифракцией на перегородках пористой структуры. При сопоставимых размерах пор и зоны разложения ВВ наблюдается иницирование детонации в горячих пятнах, образующихся на поверхности поры при ударе кумулятивной струи. Получено хорошее согласование данных по скорости детонационной волны в пористом PETN (тэн), полученных в двумерных расчетах, с данными экспериментов и расчетов по модели ЗНД. Результаты данной работы указывают на то, что методы мезомеханики позволяют прогнозировать макроскопические характеристики сложных гетерогенных сред с использованием свойств, известных для компонентов и фаз нормальной плотности.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

ВВ – взрывчатое вещество

$A_i, B_i, R_{1i}, R_{2i}, \omega_i$ – набор эмпирических констант для уравнения состояния JWL

C_i – теплоемкость вещества, Па⁰К

ρ – плотность вещества, кг/м³

P – давление, Па

v – удельный объем, м³/кг

U – массовая скорость, м/с

v_{S0} – начальный удельный объем ВВ, м³/кг

E – внутренняя энергия, Дж/кг

P_{CJ} – давление в точке Чепмена – Жуге, Н/м²

U_{CJ} – массовая скорость в точке Чепмена – Жуге, м/с

v_{CJ} – удельный объем в точке Чепмена – Жуге, м³/кг

P_N – давление в точке Неймана, Па

U_N – массовая скорость в точке Неймана, м/с

v_N – удельный объем в точке Неймана, м³/кг

D – скорость детонации ВВ, м/с

λ – массовая доля продуктов детонации

Q – теплота взрыва, Па (Дж/м³)

Нижний индекс

$i = s$ (ВВ),

g – продукты детонации

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Физика взрыва / Под ред. Л.П. Орленко // Т.1. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. 832с.
2. J. Massoni, R. Saure, G. Baudin and G. Demol, A mechanistic model for shock initiation of solid explosives // *Phys. Fluids*. **V.11**. N 3, 1999. pp.710–736.
3. J.B. Bdzil, R. Menikoff, S.F. Son, A. K. Kapila, D.S. Stewart, Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials: A critical examination of modeling issues / *Phys. Fluids*. **v.11**. N 2. 1999. pp.378–402.
4. K.A. Gonthier and J.M. Powers, A High-Resolution Numerical Method for a Two-Phase Model of Deflagration-to-Detonation Transition / *J. Comput. Phys.* **163**, 376 (2000)
5. Ю.В. Кратова, А.В. Федоров, В.М. Фомин, Т.А.Хмель, Режимы распространения плоской детонации в газозвесах в каналах с разрывом сечения / Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т.9. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-005.pdf>
6. Р.И. Нигматуллин, Основы механики гетерогенных сред // М.: Наука, 1978.- 336.
7. R. Menikoff, Interfaces and Reactive Flow, LA-UR-06-7005 (2006).
8. F.M. Najjar, W.M. Howard, and L. E. Fried, Grain-scale simulation of hot-spot initiation for shocked TATB/ 16th ASP Topical Conference on Shock Compression of Condensed Matter, Nashville (2009).
9. Ударные волны и экстремальные состояния вещества /под ред. В.Е.Фортова, Л.В.Альтшулера, Р.Ф.Трунина, А.И. Фунгилова // М.:Наука, 2000. 425с.
10. K. Kapila, D. W. Schwendeman, J.B. Bdzil, W.D. Henshaw, A study of detonation diffraction in the ignition-and-growth model, *Combust. Theory and Modeling* **11**, 781 (2007).
11. E.L. Lee and C.M. Tarver, Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives/ *Phys. Fluids*, **23**(12), 2362 (1980).
12. 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).
13. A.N. Parshikov, S.A. Medin, Smoothed Particle Hydrodynamics Using Interparticle Contact Algorithms *J. Comput. Phys.* **180**, 358 (2002)
14. В.Ф. Куропатенко, Модели механики сплошных сред / Челябинск, Челяб. Гос. Ун-т, 2007. 302с.
15. Г.И. Канель, С.В. Разоренов, А.В. Уткин, В.Е. Фортов, Ударно-волновые явления в конденсированных средах. М.: «Янус-К», 1996. 408с.
16. Ч. Мейдер, Численное моделирование детонации, М.: Мир, 1985. 384с.
17. К.К. Андреев, Ю.Б. Харитон, Некоторые соображения о механизме самораспространяющихся реакций / ДАН СССР, 1934, т.7, с.1.