

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛАБОНЕИДЕАЛЬНОЙ ДЕТОНАЦИИ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ С ВЫСОКИМ СОДЕРЖАНИЕМ УГЛЕРОДА

К. Ф. Гребёнкин, С. К. Царенкова, А. С. Шнитко

РФЯЦ, ВНИИ технической физики им. Е. И. Забахина, 456770 Снежинск, k.f.grebyonkin@vniitf.ru

Предложена расчетная модель слабонеидеальной детонации пластифицированного ТАТБ, позволяющая снизить требования к расчетной сетке и сократить затраты вычислительных ресурсов. Выполнено тестирование модели по результатам экспериментальных исследований зависимости скорости детонации от диаметра заряда и распространения детонации в кольцевом заряде.

Ключевые слова: детонация, кинетика, масштабный эффект, наноуглерод.

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что макрокинетика детонирующих конденсированных ВВ с высоким содержанием углерода, в частности ТНТ и ТАТБ, характеризуется двумя временными масштабами, что интерпретируется как проявление двух стадий процесса выделения энергии — быстрой и медленной [1]. Быстрая стадия кинетики связана с химическими реакциями разрушения исходных молекул ВВ и образования устойчивых двух- и трехатомных стабильных молекул продуктов взрыва (ПВ). Характерное время этого процесса в стационарных режимах детонации порядка десятков наносекунд [2]. Медленная стадия кинетики интерпретируется как энерговыделение в ПВ в процессе роста кластеров конденсированного углерода. Время медленного процесса соизмеримо с характерными временами газодинамических процессов [1].

В стационарной детонационной волне первая стадия локализована в зоне с характерным размером порядка 0.1 мм, поэтому для корректного моделирования кинетики химических реакций в газодинамических расчетах необходимо иметь достаточно подробную счетную сетку — характерный размер счетных ячеек должен быть порядка 0.01 мм [3]. Двумерные расчеты детонации со столь подробной сеткой требуют чрезвычайно больших затрат вычислительных ресурсов, а возможность проведения трехмерных расчетов вообще весьма проблематична [4].

Важное значение для практики имеет широкий класс задач, в которых детонация происходит в режиме, близком к идеальному, когда учет кинетики выделения энергии ВВ дает

сравнительно небольшую, но тем не менее существенную поправку. Режим слабонеидеальной детонации реализуется при одновременном выполнении двух условий. Во-первых, размеры заряда ВВ должны быть больше критической толщины распространения детонации. Во-вторых, инициирующее воздействие на ВВ должно значительно превышать порог возбуждения детонации.

Если ограничиться рассмотрением слабонеидеальных режимов детонации, то задачу можно существенно упростить, основываясь на том, что размеры, характерные для практических задач, обычно много больше ширины зоны протекания быстрых реакций. Такой подход реализован в известной модели DSD [5], в которой зависимость скорости детонации от кривизны фронта детонационной волны описана феноменологически. Существенный недостаток модели DSD состоит в том, что в ней не учитывается известный из экспериментов (см., например, [6]) и важный для практики факт зависимости эффективного давления детонации от размеров заряда. Этот масштабный эффект особенно значителен в ВВ с высоким содержанием углерода. Например, было обнаружено, что при увеличении длины заряда пластифицированного ТАТБ с 30 до 180 мм эффективное давление детонации повышается на 22 % [7]. Как показано в [3], масштабный эффект обусловлен медленным энерговыделением в процессе роста кластеров конденсированного углерода в ПВ.

В данной работе предлагается эффективная расчетная методика моделирования слабонеидеальной детонации в ВВ с повышенным содержанием углерода. Ее основная идея состоит

в том, чтобы отказаться от описания химпика и использовать для моделирования быстрой части кинетики формальный алгоритм объемного горения Чепмена — Жуге [8], широко применяемый в расчетах идеальной детонации. Тем самым исключается из рассмотрения малый пространственный масштаб (≈ 0.1 мм), характерный для быстрой кинетики. Это создает предпосылку для резкого снижения требований к расчетной сетке и в конечном счете может позволить радикально сократить затраты вычислительных ресурсов без ущерба для точности расчетов практических задач. В качестве примера применения методики выполнено расчетное моделирование некоторых экспериментов с пластифицированным ТАТБ, в которых наблюдались эффекты неидеальности в двумерной геометрии.

РАСЧЕТНАЯ МЕТОДИКА

При построении приближенной модели слабонеидеальной детонации за основу взята полная физическая модель детонации пластифицированного ТАТБ [3], в которой реализована полная кинетика энерговыделения с разными временными масштабами. В одномерных расчетах было показано, что сходимость по сетке достигается для данной модели при размере счетной ячейки порядка 0.01 мм [3]. Модель хорошо описывает масштабные эффекты, которые наблюдались в экспериментах с одномерной геометрией, в частности повышение эффективного давления детонации при увеличении длины заряда. Однако корректно реализовать полную модель кинетики в двух- и трехмерных методиках не удается из-за неприемлемо высоких требований к вычислительным ресурсам.

Предлагаемый в данной работе подход состоит в том, чтобы отказаться от детального описания быстрой части кинетики, поскольку нас не интересуют столь малые пространственно-временные масштабы, и моделировать быструю часть кинетики упрощенно, с помощью хорошо известного алгоритма объемного горения Чепмена — Жуге [8].

В данной работе использовался двумерный лагранжево-эйлеров гидрокод «Град» [9], в который для моделирования ударных волн введена искусственная вязкость. За счет искусственной вязкости скачок физических величин на фронте ударных волн сглаживается. Суть алгоритма Чепмена — Жуге состоит в том, что

концентрация ВВ W на сглаженном фронте детонационной волны вычисляется по значению удельного объема среды с помощью соотношения [8]

$$W(V) = 1 - \frac{V_0 - V}{V_0 - V_{CJ}}.$$

Здесь V_0 — начальный удельный объем перед фронтом детонационной волны, где $W = 1$; V_{CJ} — константа модели, удельный объем в точке Чепмена — Жуге, в которой $W = 0$.

В соответствии с логикой полной модели кинетики [3] представим удельное энерговыделение в детонирующем ВВ в виде суммы двух слагаемых, соответствующих быстрому и медленному процессам:

$$E(t) = q_0\alpha[1 - W(t)] + q_0(1 - \alpha)[1 - f(t)],$$

где q_0 — калорийность ВВ, α — доля энергии ВВ, выделяющейся в быстрой части кинетики, $f(t)$ — функция, характеризующая медленное энерговыделение [3],

$$f(t) = \begin{cases} 1 & \text{при } t < t_0, \\ \frac{1}{(1 + (t - t_0)/\tau_s)^{\frac{1}{n-1}}} & \text{при } t \geq t_0, \end{cases}$$

α , n , τ_s — константы медленной кинетики, t_0 — время начала медленного энерговыделения, в качестве которого принимался момент, когда в данной ячейке достигалась максимальная искусственная вязкость. В данной работе приняты значения параметров $\alpha = 0.4$, $\tau_s = 20$ нс, $n = 5$ и табличное уравнение состояния ПВ, которые использовались в полной модели детонации пластифицированного ТАТБ [3], а также значение параметра $V_{CJ} = 0.42$ см³/г.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Описание медленного энерговыделения в предлагаемой модели слабонеидеальной детонации совпадает с тем, что было реализовано в полной модели [3]. Тем самым обеспечивается воспроизведение результатов, полученных в рамках полной модели [3], по описанию одномерных экспериментов, в которых проявляются масштабные эффекты. Необходимо выяснить, описывает ли эта модель эффекты двумерной неидеальности. Ниже рассмотрены два

таких эффекта: зависимость скорости детонации от диаметра заряда пластифицированного ТАТБ и распространение детонации в кольцевом зазоре, когда фронт детонационной волны искривляется и скорость детонации заметно уменьшается по сравнению со случаем ее прямолинейного распространения.

Прежде всего, рассмотрим вопрос о сеточной сходимости двумерных расчетов по предложенной модели. Сделаем это на примере задачи о распространении детонации в цилиндрическом заряде пластифицированного ТАТБ диаметром 48 мм и длиной 160 мм с начальной плотностью 1.91 г/см^3 . На левом торце цилиндра задавался прямоугольный иницирующий импульс давления с амплитудой 20 ГПа и длительностью 0.5 мкс. Расчеты были выполнены для нескольких вариантов с разной счетной сеткой. Полученные значения средней скорости детонации по указанным интервалам на оси системы приведены в таблице.

Из таблицы видно, что при уменьшении размеров счетной сетки достигается удовлетворительная сходимость результатов расчетов. Достаточно точные результаты получаются на сетке с размером ячейки 0.4 мм. Величину сеточной погрешности определения скорости детонации в зависимости от размеров счетной сетки можно оценить в этом случае как $\approx 0.02 \text{ км/с}$, что сравнимо с погрешностью из-

мерений. Поэтому последующие расчеты проводились на сетке с размером ячейки 0.4 мм.

На рис. 1 приведена расчетная зависимость скорости детонации от обратного диаметра для взрывчатого состава X-0219 в сравнении с экспериментальными данными [10], которые аппроксимировались в [10] аналитической зависимостью

$$D(R) = D_{\infty}(1 - A/R),$$

где $D_{\infty} = 7.627 \pm 0.015 \text{ км/с}$ и $A = 0.269 \pm 0.023 \text{ мм}$.

Две линии на рис. 1 соответствуют указанным выше крайним значениям параметров зависимости $D(R)$ из [10]. Расчетные значения скорости детонации согласуются с экспериментальными данными в пределах их погрешности. Таким образом, подтвердилось предположение [11], что зависимость скорости детонации от диаметра заряда пластифицированного ТАТБ обусловлена медленным энерговыделением в ПВ.

Было также выполнено расчетное моделирование эксперимента [12], в котором исследовалось распространение детонации в кольцевом зазоре. Постановка эксперимента была выбрана таким образом, чтобы можно было считать, что система имеет плоскость симметрии. Конфигурация системы в этой плоскости показана на рис. 2. Расчет проводился для условий

Зависимость скорости детонации
в цилиндрическом заряде пластифицированного ТАТБ
диаметром 48 мм от расстояния до торца цилиндра

$L, \text{ см}$	$D, \text{ км/с}$ при $a, \text{ мм}$				
	1.6	0.8	0.4	0.2	0.1
0 ÷ 1.6	6.7312	6.8758	6.8655	6.8729	6.8743
1.6 ÷ 3.2	7.2910	7.5973	7.5704	7.5668	7.5686
3.2 ÷ 4.8	7.2284	7.5901	7.5847	7.5883	7.5901
4.8 ÷ 6.4	7.1397	7.5490	7.5847	7.6046	7.6082
6.4 ÷ 8.0	7.0609	7.5065	7.5579	7.5973	7.6100
8.0 ÷ 9.6	7.0237	7.4906	7.5401	7.5722	7.5865
9.6 ÷ 11.2	7.0083	7.4836	7.5294	7.5579	7.5614
11.2 ÷ 12.8	7.0022	7.4766	7.5259	7.5436	7.5543
12.8 ÷ 14.4	6.9991	7.4801	7.5223	7.5401	7.5436

Примечание. a — размер счетной ячейки, L — интервал расстояний от торца цилиндра, в котором определялась средняя скорость.

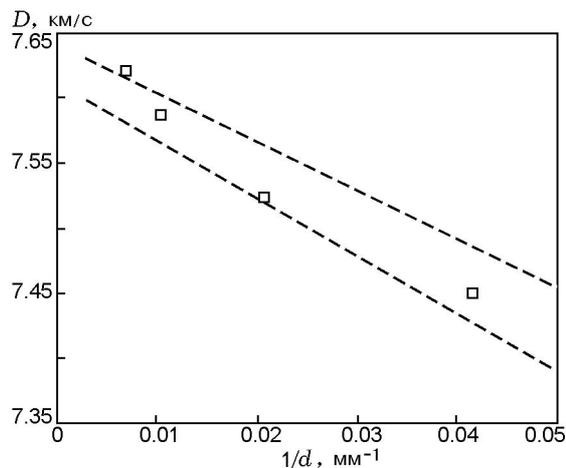


Рис. 1. Зависимость скорости детонации от обратного диаметра цилиндрического заряда пластифицированного ТАТБ:

квадраты — результаты расчетов данной работы, линии — пределы изменения экспериментальных данных [10] с учетом их погрешности

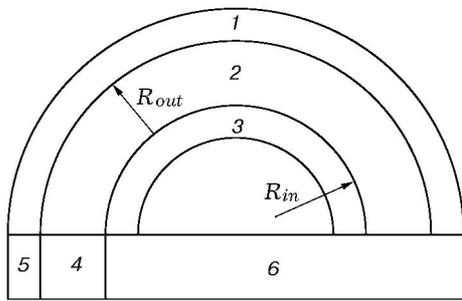


Рис. 2. Схема эксперимента [12] по изучению распространения детонации пластифицированного ТАТБ в полукольцевом зазоре: 1, 3, 5, 6 — сталь, 2 — исследуемое ВВ, 4 — инициирующее ВВ

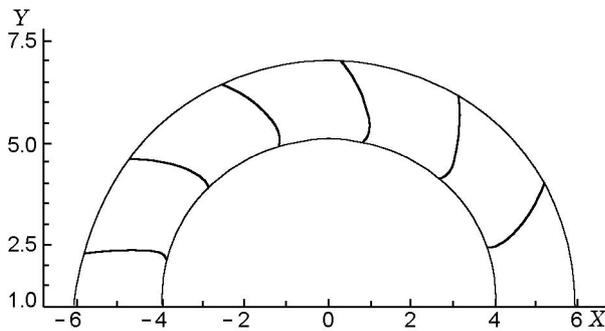


Рис. 3. Расчетная форма фронта детонационной волны в полукольцевом зазоре, полученная с шагом по времени 3 мкс (детонационная волна распространяется слева направо)

эксперимента, в котором области 1, 3, 5 и 6 выполнены из стали; наружный радиус исследуемого ВВ $R_{out} = 60$ мм, внутренний — $R_{in} = 40$ мм.

Полученная в расчетах форма детонационной волны, распространяющейся по кольцевому зазору, показана на рис. 3. В эксперименте измерялось время прихода детонационной волны на внутренний и наружный радиусы исследуемого ВВ в зависимости от угла поворота детонационной волны θ ($\theta = 0$ соответствует направлению влево на рис. 2). Разновременность прихода на внешнюю и внутреннюю границы ВВ (Δt) характеризует форму детонационной волны в кольцевом зазоре. Расчетная зависимость $\Delta t(\theta)$ хорошо согласуется с экспериментальными данными [12] (рис. 4). Расчет показал, что после поворота детонационной волны на угол $50 \div 60^\circ$ ее форма и скорость

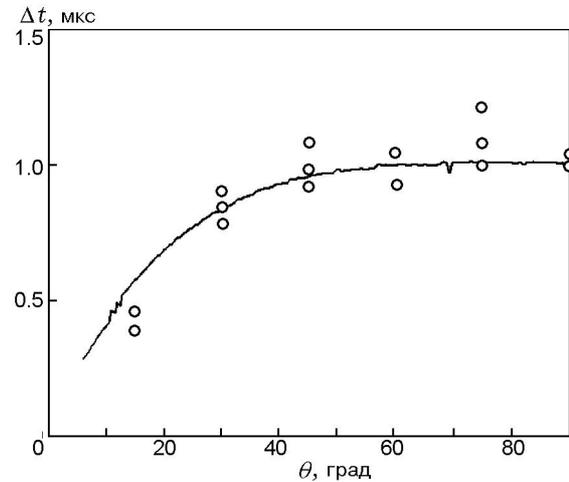


Рис. 4. Разновременность прихода детонационной волны на наружную и внутреннюю поверхности исследуемого ВВ в зависимости от угла поворота детонационной волны в кольцевом зазоре:

линия — расчет данной работы, точки — эксперимент [12]

распространения стабилизируются. После выхода детонационной волны на стационарный режим условия инициирования «забываются». Тот факт, что в расчетах удалось описать как результаты данного эксперимента, так и зависимость скорости детонации от диаметра заряда, подтверждает реалистичность предлагаемой модели слабонеидеальной детонации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные результаты подтвердили предположение о том, что основной причиной неидеальности детонации пластифицированного ТАТБ в условиях, далеких от критических, является медленное энерговыделение в процессе роста наночастиц конденсированного углерода в продуктах взрыва. Основанная на этом предположении расчетная модель позволяет решить проблему сеточной сходимости и воспроизводит результаты двумерных экспериментов, в которых проявлялись эффекты неидеальности. Снижение требований к счетной сетке достигнуто ценой отказа от описания околокритических режимов детонации и тонких эффектов, связанных с химпиком.

Предложенная модель может стать альтернативой известной модели DSD, поскольку она учитывает не только влияние кривизны фронта на скорость распространения детона-

ционной волны, но и эффект медленного нарастания эффективного давления детонации при увеличении длины заряда, который игнорируется в модели DSD.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Tarver C. M., Kury J. W., Breithaupt R. D.** Detonation waves in triaminotrinitrobenzene // *J. Appl. Phys.* 1997. V. 82, N 8. P. 3771–3782.
2. **Tarver C. M.** Multiple roles of highly vibrationally excited molecules in the reaction zones of detonation waves // *J. Phys. Chem. A.* 1997. V. 101. P. 4845–4851.
3. **Grebenkin K. F., Taranik M. V., Zhrebtsov A. L.** Computer modeling of scale effects at heterogenous HE detonation // Thirteenth Symp. (Intern.) on Detonation. Norfolk, 2006. Office of Naval Research. ONR 351-07-01. P. 496–505.
4. **Aslam T. D.** Direct numerical simulation of detonation // *Shock Compression of Condensed Matter-2005* / M. D. Furnish, M. Elert, T. P. Russell, C. T. White (Eds). AIP, 2006. P. 931–935.
5. **Bdzil J. B., Fickett W., Stewart D. S.** Detonation shock dynamics: A new approach to modeling multidimensional detonation waves // Ninth Symp. (Intern.) on Detonation. Portland, 1989. Office of Naval Research. OCNR 113291-7. P. 730–742.
6. **Bdzil J. B., Davis W. C.** Time-dependent detonations // *LASL Report LA-5926-MS.* 1975.
7. **Любятинский С. Н., Костицын О. В., Филин В. П. и др.** Экспериментальное исследование нарастания детонации в низкочувствительном ВВ // VII Харитоновские тематические научные чтения, 14–18 марта 2005: Сб. тез. докл. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2005. С. 73–74.
8. **Мейдер Ч.** Численное моделирование детонации. М.: Мир, 1985.
9. **Suchkov V. A., Shnitko A. S.** Technique and set of programs GRAD for solution of nonstationary problems of continua mechanics // Third Joint Conf. on Computational Mathematics. Los Alamos, NM, USA, January 23–27, 1995.
10. **Campbell A. W., Engelke R.** The diameter effect in high-density heterogeneous explosives // Sixth Symp. (Intern.) on Detonation. Coronado, 1976. P. 642–652.
11. **Viecelli J. A., Ree F.H.** Carbon clustering kinetics in detonation wave propagation // *J. Appl. Phys.* V. 86, N 1. 1999. P. 237–248.
12. **Luvatsky S. N., Batalov S. V., Garmashev A. Yu., et al.** Detonation propagation in 1800 ribs of an insensitive high explosive // *Shock Compression of Condensed Matter-2003* / M. D. Furnish, Y. M. Gupta, J. W. Forbes (Eds). AIP, 2004. P. 859–862.

Поступила в редакцию 17/IV 2007 г.