

ПРОВЕРКА И ОЦЕНКА ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОГО МЕТОДА РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ ДЕТОНАЦИИ CHNO-ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ

Вагенлейтнер А.О.¹, Копнов Д.В.²

¹Вагенлейтнер Анастасия Олеговна - студентка специалитета факультета
ФИТЭ, Пензенский государственный университет

²Копнов Даниил Вячеславович – студент специалитета факультета
ФИТЭ, Пензенский государственный университет

г. Пенза, Российская Федерация

Аннотация: была рассмотрена простая полуэкспериментальная схема для расчета параметров детонации взрывчатых веществ типа CHNO, основанная на экспериментальных значениях параметров детонации большого количества взрывчатых веществ разных составов. По сравнению с численной моделью, основанной на уравнении состояния Беккера–Кистяковского–Вильсона (BKW), она позволяет получить значительно меньшие отклонения расчетных параметров детонации от экспериментальных значений.

Ключевые слова: моделирование детонации, скорость детонации, давление детонации, CHNO-взрывчатые вещества

VERIFICATION AND EVALUATION OF SEMI-EMPIRICAL METHOD FOR CALCULATION OF DETONATION PARAMETERS OF CHNO- EXPLOSIVE SUBSTANCES

Vagenleytner A.O.¹, Kopnov D.V.²

¹Vagenleytner Anastasia Olegovna - student of the faculty's specialty FITE, Penza
State University

²Kopnov Daniil Vyacheslavovich - student of the faculty's specialty FITE, Penza State
University

Penza, Russian Federation

Abstract: a simple semi-experimental scheme for calculating the detonation parameters of explosives of the CHNO type, based on the experimental values of the detonation parameters of a large number of explosives of different compositions, was considered. Compared to the numerical model based on the Becker – Kistyakovsky –



Wilson (BKW) equation of state, it allows one to obtain significantly smaller deviations of the calculated detonation parameters from the experimental values.

Keywords: *detonation simulation, detonation velocity, detonation pressure, CHNO – explosives.*

УДК 662.215.121

Наличие возможности точного надежного прогнозирования и расчета характеристик детонации значительно ускоряет процесс поиска новых взрывчатых веществ и различных взрывчатых смесей и уменьшает связанные с этим затраты.

Есть два подхода к решению этой проблемы. Первый основан на численном моделировании процесса детонации, а второй - на гораздо более простых эмпирических и полуэмпирических моделях.

Лаборатории в развитых странах, разработали первые компьютерные программы для численного моделирования взрывов еще 50-60 лет назад. В течение последних лет они работали над совершенствованием моделей численного моделирования нестационарной детонации.

В 1961 году Мадер и др. Создали программу для расчета параметров детонации, названную STRETCHBKW. Она характеризовалась высокой скоростью и давала удовлетворительные результаты с использованием только одной серии констант в уравнении состояния BKW, для всех взрывчатых веществ.

Позднее были разработаны другие варианты программы, использующие уравнение состояния BKW. Например, Шерет и его сотрудники разработали программы под названием ARPAGE и LA MINEUR. Каупертвейт и его сотрудники разработали программу TIGAR, основанную на уравнении состояния JCZ. В 1967 году Мадер разработал программу FORTRAN BKW, которая очень распространена в исследовательских учреждениях многих стран и на сегодняшний день несколько раз совершенствовалась [1, 2].

Однако из-за своей сложности и объемности численные модели не подходят для инженерных нужд. Поэтому для большего удобства были



разработаны различные полуэмпирические методы, которые проще использовать на практике. Одним из наиболее известных является метод Камлета, который дает удовлетворительные результаты для взрывчатых веществ типа CHNO , плотность которых превышает 1 г / см^3 [3].

В этой статье рассмотрен в практическом применении один из новых полуэмпирических методов вычисления параметров детонации взрывчатых веществ типа CHNO , который дает значительно меньшие отклонения от экспериментальных значений по сравнению с известными методами.

Из гидродинамической теории детонации известны следующие уравнения, связывающие давление детонации p , скорость детонации D , плотность взрывчатого вещества ρ_0 , и теплота детонации Q :

$$D = \sqrt{2(\gamma^2 - 1)}Q \quad (1)$$

$$D = \frac{1}{\rho_0} \sqrt{\frac{p}{\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_{CJ}}}} \quad (2)$$

$$p = \frac{1}{\gamma+1} \rho_0 D^2 \quad (3)$$

$$\frac{\rho_{CJ}}{\rho_0} = \frac{\gamma+1}{\gamma} \quad (4),$$

где γ - показатель политропы.

Включив уравнение (1) в уравнение (3), получим:

$$p = \frac{2(\gamma^2-1)}{\gamma+1} \rho_0 Q \quad (5)$$

Принимаем во внимание экспериментально-подтвержденный факт, что показатель политропы пропорционален плотности взрывчатого вещества. Тогда на основе уравнения состояния газов мы видим, что давление, пропорционально количеству молей газообразных продуктов детонации n , и выражение (5) можно представить в общем виде следующим образом:

$$p = A \rho_0^x n Q \quad (5), \text{ где } A \text{ и } x \text{ - эмпирические константы.}$$

Аналогичным образом, включив это выражение в уравнение (2) и принимая во внимание уравнение (4), можно получить следующее выражение для расчета скорости детонации:



$D = Bp_0^y \sqrt{nQ}$ (6), где B и y - эмпирические константы.

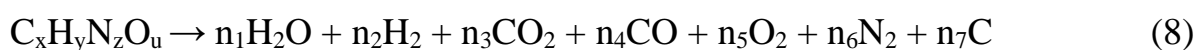
Выражения (5) и (6) определены путем регрессионного анализа экспериментальных данных по зависимости давления и скорость детонации от плотности взрывчатого вещества.

Количество молей газообразных продуктов детонации n , может быть найдено с использованием стандартного для таких расчетов метода Авакяна. По экспериментальным данным было обнаружено, что коэффициент реализации (K) связан с кислородным коэффициентом (K_k) следующим соотношением:

$$K = 0,32K_k^{0.24} \quad (7)$$

Кислородный коэффициент выражается в процентах

Если пренебречь присутствием аммиака в продуктах детонации, реакцию взрывчатого превращения можно записать следующим образом:



Состав основан на предположении, что коэффициент K обозначает степень окисления водорода в воду.

Другими словами, предполагается, что из максимального числа молей $\frac{y}{2}$, в условиях взрыва, получено $K\frac{y}{2}$ моля воды, а $(1 - K)\frac{y}{2}$ моля остаются в форме H_2 . В этом случае:

$$n_1 = K\frac{y}{2} \text{ и } n_2 = (1 - K)\frac{y}{2}.$$

Количество молей азота будет равно:

$$n_6 = \frac{z}{2}$$

Чтобы определить количество молей других продуктов детонации, необходимо решить уравнение реакции взрывчатого превращения. При составлении этих уравнений необходимо учитывать соотношение кислорода, углерода и водорода в молекуле взрывчатого вещества. В зависимости от этого отношения можно выделить три случая:

Случай 1 : $K_k > 100\%$.

Предполагается, что в конечных продуктах нет свободного углерода, т.е.
 $n_7 = 0$.



Следующие отношения используются для вычисления n_3 , n_4 и n_5 :

$$n_3 = (1,4K - 0,4) x$$

$$n_4 = x - n_3 = 1,4x (1 - K)$$

$$n_5 = \frac{(x - 2 n_3 - n_4 - n_1)}{2}$$

Случай 2: $K_k < 100\%$

Предполагается, что в составе продуктов взрыва нет кислорода, т.е. $n_5 =$

0. Другие неизвестные вычисляются с использованием следующих уравнений:

$$n_3 = 1,16u (K - 0,568) - 0,5 n_1$$

$$n_4 = u - (2 n_3 + n_1) = u [1 - 2,32 (K - 0,568)]$$

$$n_7 = x - (n_3 + n_4)$$

Случай 3: $K_k < 100$, но $O > (C + H/2)$.

Формулы расчета состава имеют вид :

$$n_3 = 0,7(u - \frac{y}{2})K - 0,4x$$

$$n_4 = 1,4x - 0,7 \left(u - \frac{y}{2}\right) K$$

Исходя из определенного таким образом состава продуктов детонации, их общая теплота образования и теплота взрыва могут быть рассчитаны с использованием закона Гесса на основе выражения:

$$Q = \sum_{i=1}^n \Delta U_{fi_{prod}}^0 - \sum_{j=1}^m \Delta U_{fj_{EM}}^0 \quad (9)$$

где $i = \overline{1, n}$ представляет количество продуктов детонации, а $j = \overline{1, m}$ - количество компонентов, которые входят в состав взрывчатого вещества.

Данные о теплоте образования взрывчатых веществ и продуктов детонации можно найти в термодинамических таблицах (см. рисунок 1).



Продукты взрыва	$Q_{обр}$, кДж/моль	ВВ	$Q_{обр}$, кДж/моль
CO	110,5	тротил	42,3
CO ₂	393,5	гексоген	-93,4
H ₂ O _(н)	241,8	тетрил	-55,7
H ₂ O _(ж)	285,8	ТЭН	539,7
NO	-90,5	октоген	-71,0
NO ₂	-34,8	нитроглицерин	346,5
NH ₃	43,6	пикриновая кислота	227,6
CH ₄	72,0	тринитроксилол	109,6
HCl	92,0	динитронафталин	192,0
Al ₂ O ₃	1666,4	нитродигликоль	416,5

Рисунок 1 – Значения теплоты образования некоторых веществ

Следует подчеркнуть, что метод Авакяна дает состав конечных продуктов детонации после их расширения и охлаждения.

Проверка применимости и оценка надежности данной схемы расчета была проведена на 5 составах взрывчатых веществ (различной плотности), которые имели экспериментальные значения давления и скорости детонации (таблица 1).

Для этих взрывчатых составов количество молей газообразных продуктов детонации и теплота взрыва сначала были рассчитаны с использованием метода Авакяна.

Регрессионный анализ результатов позволил определить значения эмпирических констант.

Тогда выражения (5) и (6) (рисунки 2 и 3), можно представить в явной форме:

$$p = 0,00048p_0^2 nQ \quad (10)$$

$$D = 13,2p_0^{0,6} \sqrt{nQ} \quad (11),$$

где ρ_0 – плотность в г/см³, n - количество молей газообразных продуктов на 1 кг эквивалентной массы, Q - теплота взрыва в кДж / кг.



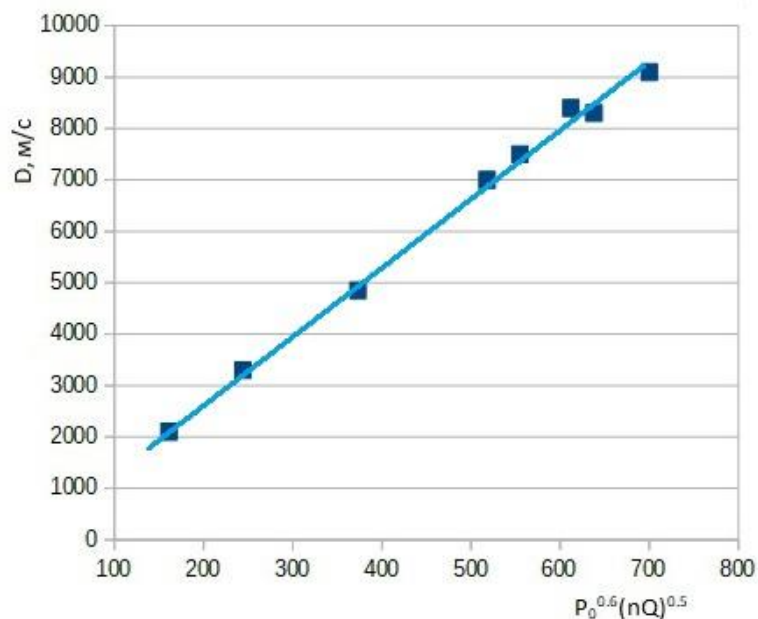


Рисунок 2 - Сравнение расчетных и экспериментальных значений скоростей детонации для различных ВВ.

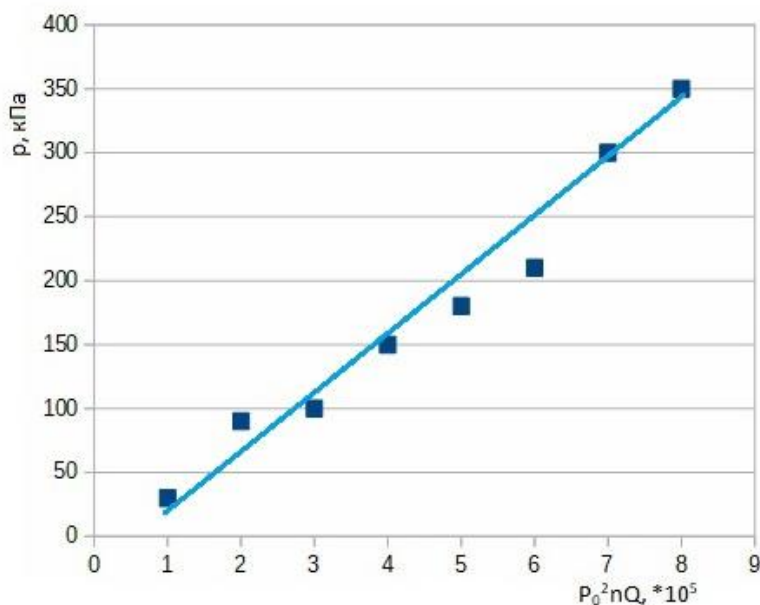


Рисунок 3 - Сравнение расчетных и экспериментальных значений давления детонации для различных взрывчатых веществ.

Высокие значения коэффициентов корреляции ($R^2=0,99$) для 5 испытанных составов подтверждают применимость предложенной модели для прогноза приближенных значений параметров детонации [4].

В таблице 1 приведено также сравнительное представление средних отклонений расчетных значений параметров детонации, полученных двумя методами, по отношению к экспериментальным значениям.



Согласно рассматриваемой модели, среднее отклонение значения давления детонации $\approx 3,22\%$, скорости детонации $\approx 1,94\%$.

Отклонение получается меньше по сравнению с результатами численной модели, которая использует уравнение состояния ВКВ для описания поведения газообразных продуктов детонации.

Кроме того, в отличие от метода Камлета, модель применима к любой плотности взрывчатого вещества.

Применимость модели была дополнительно проверена на нескольких различных составах взрывчатых веществ (таблица 2). Отклонения экспериментальных и расчетных значений невелики и находятся в пределах экспериментальной ошибки.

Следует отметить, что на сегодняшний день научные данные по вопросу экспериментального определения значений давления детонации сильно варьируются, так как надежное измерение данного значения затруднительно.

Таблица 1 Сравнение значений параметров детонации, полученных разными методами.

№	Название ВВ	P_0 , г/см ³	Данные эксперимента		ВКВ (1)		Рассматриваемый метод (2)		Погрешность (1), %		Погрешность (2), %	
			D, м/с	$P \cdot 10^5$, кПа	D, м/с	$P \cdot 10^5$, кПа	D, м/с	$P \cdot 10^5$, кПа	D, м/с	$P \cdot 10^5$, кПа	D, м/с	$P \cdot 10^5$, кПа
1	Октоген	1,9	9100	393,0	9288	391	9123	359,3	2,1	0,5	2,6	7,9
2	ТЭН	1,77	8300	246,0	8672	243	8379	248	4,5	1,2	0,9	0,8
3	Гексоген	1,82	8400	347,0	8795	339	8527	306,9	0,5	2,3	0,1	3,1
4	Тетрил	1,63	7500	245,0	7750	253	7766	249,8	2,5	3,3	2,7	2,7
5	Тротил	1,6	7000	176,5	7010	198	6702	178	1	12,2	3,4	1,6

Таблица 2 Результаты испытаний моделей на нескольких смесевых ВВ

№	Смесь ВВ	P_0 , г/см ³	P, кПа			D, м/с		
			Эксперимент	Рассматриваемый метод	Погрешность, %	Эксперимент	Рассматриваемый метод	Погрешность, %
1	Октоген - 50% Алюматол - 30%	1,79	834,44	726,65	12	7285	7311	0,4



	Al -20%							
2	Тротил - 50% Граммотол - 40% Al - 10%	1,41	879,74	812,39	7,7	7246	7304	0,8
3	Гексоген – 80% Тротил – 20%	2,72	871,72	807,12	7,4	8011	7954	0,7

Согласие между экспериментальными и расчетными значениями параметров детонации в широком диапазоне плотности ВВ находится в пределах погрешности экспериментальных измерений [5].

Полученное среднее отклонение результатов примерно вдвое меньше результатов известных методов, что подтверждает правильность модели. Модель была подтверждена дополнительными испытаниями с несколькими различными взрывчатыми веществами.

Список литературы

1. Авдеев А.А. Введение в теорию энергетических материалов: учебное пособие: в 2 ч./ А.А. Авдеев, В.Ф. Ульянов. – Пенза: Изд-во ПГУ, 2016. – Ч. 1. Взрывчатые вещества и пороха. – 76 с.
2. Станюкович К.П., Баум Ф.А., Шехтер Б.И. Физика взрыва: учебное пособие; Москва – «Книга по требованию», - 806 с.
3. Бажин, В.Е. Взрыв, взрывчатые вещества, их применение: учебное пособие / В.Е. Бажин и др.; Алт. гос. техн. ун-т, БТИ. – Бийск: Изд-во Алт. гос. техн. ун-та, 2008. – 104 с.
4. Айзенштадт И. Н. // Физика горения и взрыва. 1976. Т.12. №5 С. 758-763.
5. Акимова Л. Н., Стесик Л. Н. // Физика горения и взрыва. 1994. Т.30. №5. С. 97-99.

