

## РАСЧЕТНОЕ ОПИСАНИЕ ОПЫТОВ С ТЕПЛОВЫМ ВЗРЫВОМ ВВ НА ОСНОВЕ ОКТОГЕНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МНОГОСТАДИЙНОЙ КИНЕТИКИ ТЕРМОРАЗЛОЖЕНИЯ В ПАКЕТЕ ПРОГРАММ ЛОГОС

А. Ю. Вишняков, В. А. Глазунов, А. А. Кабаев, С. А. Кабаев, В. А. Устиненко

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Для расчетного определения поведения конструкций с ВВ в условиях внешнего нагрева в программном модуле Логос Тепло реализована модель воспламенения ВВ, основанная на трехстадийной кинетике терморазложения, в которой учитываются лимитирующие химические реакции, определяющие процесс воспламенения.

С использованием модели воспламенения выполнено численное моделирование маломасштабных (масса ВВ несколько граммов) и крупномасштабных (масса ВВ несколько килограммов) экспериментов с тепловым взрывом ВВ на основе октогена при различных режимах внешнего нагрева: маломасштабные опыты со статическим нагревом, являющиеся наиболее жестким тестом для верификации теоретических моделей воспламенения ВВ, и крупномасштабные опыты с динамическим (линейным) нагревом образцов ВВ. Определены характер и параметры воспламенения (время задержки воспламенения, положение очага воспламенения, поля температуры и концентраций ВВ). Показано, что трехстадийная кинетика терморазложения ВВ позволяет достаточно точно (в пределах погрешности эксперимента) описывать влияние масштабного фактора и режима нагрева на воспламенение ВВ.

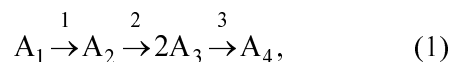
*Ключевые слова:* взрывчатое вещество, многостадийная кинетика терморазложения, время задержки воспламенения, очаг воспламенения, тепловой взрыв, режим нагрева, поле температуры.

В настоящее время во ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» разрабатывается многофункциональный пакет программ инженерного анализа и суперкомпьютерного моделирования Логос [1] для высокотехнологичных отраслей промышленности. Одним из модулей пакета программ Логос является модуль Логос Тепло, предназначенный для моделирования процессов теплопереноса в различных конструкциях при тепловом воздействии.

Для расчетного определения поведения конструкций с взрывчатыми веществами (ВВ) в условиях внешнего нагрева в модуле расчета теплопроводности Логос Тепло реализована модель воспламенения ВВ на основе октогена [2–4].

Представим основные положения модели воспламенения ВВ. В соответствии с [2] кинетика терморазложения октогена протекает по трехстадийному процессу (эти три стадии соответствуют трем относительно медленным процессам, зареги-

стрированным в экспериментах, которые в основном и определяют время задержки воспламенения)<sup>1</sup>:



где вещество  $A_1$  – исходный октоген;  $A_2$  – конденсированный продукт  $H_2C = N - NO_2$ ;  $A_3$  – промежуточные газовые продукты  $CH_2O + N_2O$  или  $HCN + HNO_2$ , между которыми не делается различия;  $A_4$  – конечные газовые продукты (рассматриваются как одно вещество). В трехстадийной схеме терморазложения октогена первая ста-

---

<sup>1</sup>При терморазложении октогена протекает более ста химических реакций. Представленные в кинетической модели терморазложения ВВ химические реакции обладают наибольшей длительностью и тепловым эффектом, что оказывает значительное влияние на процесс воспламенения.

дия является эндотермической, вторая и третья экзотермическими.

Аналогично работе [4] получим систему уравнений химической кинетики для реакций (1). Из принципа детального равновесия для одной химической реакции в смеси следует [5]:

$$\frac{dc_i}{dt} = (v_i'' - v_i')\omega, \quad (2)$$

где

$$\omega = k \prod_{j=1}^N c_j^{v_j'}. \quad (3)$$

В выражениях (2) и (3) введены следующие обозначения:  $c_i$  – мольная концентрация  $i$ -го компонента смеси (число молей данного компонента в единице объема);  $v_i'$  и  $v_i''$  – стехиометрические коэффициенты для  $i$ -го компонента, выступающего в качестве реагента ( $v_i'$ ) и продукта реакции ( $v_i''$ );  $N$  – число компонентов смеси;  $k$  – константа скорости химической реакции.

С учетом (2) и (3) получим: для первой реакции:

$$\frac{dc_1}{dt} = -k_1 c_1 \quad \text{и} \quad \frac{dc_2}{dt} = k_1 c_1; \quad (4)$$

для второй реакции:

$$\frac{dc_2}{dt} = -k_2 c_2 \quad \text{и} \quad \frac{dc_3}{dt} = 2k_2 c_2; \quad (5)$$

для третьей реакции:

$$\frac{dc_3}{dt} = -2k_3 c_3^2 \quad \text{и} \quad \frac{dc_4}{dt} = k_3 c_3^2. \quad (6)$$

Перейдем от  $c_i$  к относительным массовым концентрациям  $w_i$ . Пусть  $\mu_i$  – молярная масса  $i$ -го компонента. Тогда масса  $i$ -го компонента в единице объема смеси равна  $\mu_i c_i$ , а его относительная массовая концентрация  $w_i = \frac{\mu_i c_i}{\rho}$  ( $\rho$  – плотность смеси).

Пренебрежем изменением плотности смеси  $\rho$  в процессе нагрева вплоть до воспламенения. Это практически всегда имеет место, поскольку к моменту воспламенения смеси образуется небольшое количество газовой фазы. По оценкам [2] относительная массовая концентрация газовой фазы на момент воспламенения ВВ составляет  $\approx 8\%$  от общей массы. Поэтому считаем, что  $\rho \approx \text{const}$ , тогда из (4)–(6) получаются следующие уравнения для относительных массовых концентраций (учитывается, что  $\mu_1 = \mu_2 = 2\mu_3 = \mu_4$ ):

для первой реакции

$$\frac{dw_1}{dt} = -k_1 w_1 \quad \text{и} \quad \frac{dw_2}{dt} = k_1 w_1; \quad (7)$$

для второй реакции:

$$\frac{dw_2}{dt} = -k_2 w_2 \quad \text{и} \quad \frac{dw_3}{dt} = k_2 w_2; \quad (8)$$

для третьей реакции:

$$\frac{dw_3}{dt} = -\left(\frac{2k_3 \rho}{\mu_3}\right) w_3^2 \quad \text{и} \quad \frac{dw_4}{dt} = \left(\frac{2k_3 \rho}{\mu_3}\right) w_3^2. \quad (9)$$

Для того чтобы константы скоростей химических реакций в (7)–(9) имели одну размерность [ $\text{с}^{-1}$ ], введем обозначения:

$$K_i = k_i, \quad i = 1, 2; \quad K_3 = \frac{2k_3 \rho}{\mu_3}.$$

Окончательно система обыкновенных дифференциальных уравнений для трехстадийной кинетики терморазложения (1) примет вид:

$$\begin{cases} \frac{dw_1}{dt} = -K_1 w_1; \\ \frac{dw_2}{dt} = K_1 w_1 - K_2 w_2; \\ \frac{dw_3}{dt} = K_2 w_2 - K_3 w_3^2; \\ w_4 = w_0 - \sum_{j=1}^3 w_j; \end{cases} \quad (10)$$

где  $w_0$  – начальная массовая концентрация октогена ( $w_0 = 1$  – для чистого ВВ;  $0 < w_0 < 1$  – для смеси ВВ). При определении массовой концентрации четвертого компонента использовался закон сохранения массы в элементарном объеме.

С учетом (1) и принятых допущений о неподвижности вещества и постоянства плотности смеси представим уравнение сохранения энергии с источником объемного тепловыделения (считается, что компоненты смеси терморазложения ВВ находятся в тепловом и механическом равновесии):

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(\lambda \nabla T) + \rho \left( q_1 w_1 K_1 + q_2 w_2 K_2 + q_3 w_3^2 K_3 \right), \quad (11)$$

здесь  $T$  – температура;  $C$ ,  $\lambda$  – удельная теплоемкость и теплопроводность смеси;  $q_j$  – тепловой эффект  $j$  реакции ( $j$  равно от 1 до 3). Скорости химических реакций  $K_j$  записываются в виде закона Аррениуса:

$$K_j = Z_j \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right), \quad (12)$$

где  $Z_j$  – предэкспоненциальный множитель,  $E_j$  – энергия активации  $j$  реакции,  $R$  – универсальная газовая постоянная.

Теплоемкость  $C$  и теплопроводность  $\lambda$  смеси продуктов терморазложения ВВ рассчитываются по формулам:

$$C = \sum_{j=1}^4 (w_j C_j), \quad \lambda = \sum_{j=1}^4 (w_j \lambda_j), \quad (13)$$

где  $w_j$ ,  $C_j$ ,  $\lambda_j$  – массовая концентрация, удельная теплоемкость и теплопроводность  $j$  компонента смеси ( $j = 1$  – октоген;  $j$  равно от 2 до 4 – промежуточные и конечные продукты реакций).

Теплофизические и кинетические параметры смеси терморазложения ВВ приведены в табл. 1–3.

Валидация модели воспламенения ВВ на основе октогена, реализованной в программном модуле Логос Тепло, проводилась на экспериментах

с тепловым взрывом маломасштабных (масса ВВ несколько граммов) и крупномасштабных (масса ВВ несколько килограммов) образцов ВВ в герметичных сборках без свободного объема, подверженных различным режимам внешнего нагрева.

В качестве маломасштабных опытов с тепловым взрывом ВВ рассмотрены опыты ODTX (One Dimensional Time to eXplosion – одномерное время до взрыва) [2], в которых сплошные шары диаметром 1,27 см (1/2 дюйма) и цилиндры диаметром 5,08 см (2 дюйма) из ВВ на основе октогена в прочных герметичных оболочках подвергались статическому нагреву (на поверхности ВВ поддерживалась постоянная температура). В опытах была определена зависимость времени задержки воспламенения ВВ  $t_{\text{в}}$  от граничной температуры  $T_{\text{гр}}$ . Данные эксперименты являются более удобными для численного моделирования, чем аналогичные опыты с открытыми ВВ, поскольку прочная оболочка удерживает образующиеся при терморазложении ВВ газы и исключает утечку газов наружу из сборки, которую сложно моделировать.

Таблица 1

Зависимость удельной теплоемкости  $C_k(T)$

$T, ^\circ\text{C}$	$C_1, \text{Дж}/(\text{кг}\cdot\text{К})$	$C_2, \text{Дж}/(\text{кг}\cdot\text{К})$	$C_3, \text{Дж}/(\text{кг}\cdot\text{К})$	$C_4, \text{Дж}/(\text{кг}\cdot\text{К})$
20	$1,005 \cdot 10^3$	$0,921 \cdot 10^3$	$1,005 \cdot 10^3$	$1,130 \cdot 10^3$
160	$1,424 \cdot 10^3$	$1,298 \cdot 10^3$	$1,130 \cdot 10^3$	$1,172 \cdot 10^3$
260	$1,675 \cdot 10^3$	$1,507 \cdot 10^3$	$1,214 \cdot 10^3$	$1,214 \cdot 10^3$
350	$1,926 \cdot 10^3$	$1,758 \cdot 10^3$	$1,298 \cdot 10^3$	$1,256 \cdot 10^3$
500	$2,303 \cdot 10^3$	$2,093 \cdot 10^3$	$1,465 \cdot 10^3$	$1,298 \cdot 10^3$
$\geq 1000$	$2,303 \cdot 10^3$	$2,093 \cdot 10^3$	$1,758 \cdot 10^3$	$1,465 \cdot 10^3$

Таблица 2

Зависимость теплопроводности  $\lambda_k(T)$

$T, ^\circ\text{C}$	$\lambda_1, \text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$	$\lambda_2, \text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$	$\lambda_3, \text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$	$\lambda_4, \text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$
20	$5,1498 \cdot 10^{-1}$	$2,7214 \cdot 10^{-1}$	$4,1868 \cdot 10^{-2}$	$4,1868 \cdot 10^{-2}$
160	$4,0612 \cdot 10^{-1}$	$2,0934 \cdot 10^{-1}$	$4,1868 \cdot 10^{-2}$	$4,1868 \cdot 10^{-2}$
260	$3,3913 \cdot 10^{-1}$	$1,6747 \cdot 10^{-1}$	$4,1868 \cdot 10^{-2}$	$4,1868 \cdot 10^{-2}$
$\geq 350$	$2,9308 \cdot 10^{-1}$	$1,2560 \cdot 10^{-1}$	$4,1868 \cdot 10^{-2}$	$4,1868 \cdot 10^{-2}$

Таблица 3

Кинетические параметры

Номер реакции $i$	1	2	3
$E_i, \text{Дж}/\text{моль}$	$2,2064 \cdot 10^5$ (52,7 ккал/моль)	$1,8464 \cdot 10^5$ (44,1 ккал/моль)	$1,4277 \cdot 10^5$ (34,1 ккал/моль)
$Z_i, \text{с}^{-1}$	$\exp(48,7)$	$\exp(37,5)$	$\exp(28,1)$
$q_i, \text{Дж}/\text{кг}$	$-0,41868 \cdot 10^6$ (-0,1 ккал/г)	$1,25604 \cdot 10^6$ (0,3 ккал/г)	$5,02416 \cdot 10^6$ (1,2 ккал/г)

Кроме того, рассмотренные опыты позволяют определить наиболее низкие пороги воспламенения ВВ, что обусловлено наличием горячих газовых продуктов в зоне реакции, облегчающих воспламенение ВВ. При моделировании экспериментов ODTX не учитывался градиент температуры в металлической оболочке, а граничная температура  $T_{гр}$  задавалась непосредственно на внешней поверхности ВВ. Расчетное время  $t_b$  соответствует моменту времени начала резкого роста зависимости  $T(t)$  в очаге воспламенения (производная  $\left. \frac{dT}{dt} \right|_{t_b} \rightarrow \infty$ ).

Результаты моделирования опытов представлены на рис. 1, 2<sup>2</sup>.

Полученные по программному модулю Логос Тепло результаты расчетов с использованием трехстадийной кинетики терморазложения ВВ хорошо согласуются с экспериментальными данными. Для шара ВВ наблюдается небольшое (не более  $\approx 2\%$ ) занижение критической температуры ( $\approx 187^\circ\text{C}$ ) по сравнению с экспериментом ( $\approx 191^\circ\text{C}$ ), при этом для цилиндра ВВ согласие с опытом лучше, чем расчетов из [2]. Одностадийная кинетика<sup>3</sup> не описывает эксперименты. Вариация предэкспоненциального множителя в пределах  $Z$  от  $5 \cdot 10^{18}$  до  $5 \cdot 10^{20} \text{ c}^{-1}$  не позволяет добиться согласия. При повышении  $Z$  согласие становится лучше по критической температуре, но хуже по времени задержки воспламенения. Аналогичная ситуация наблюдается при вариации энергии активации  $E$ . Отсюда следует важный для практики вывод: попытка описать экспериментальные значения  $t_b$  при относительно высоких температурах подбором величин  $Z$  и  $E$  в расчетах с одностадийной кинетикой терморазложения может привести к завышению критической температуры. Наблюдаются отличия от эксперимента и в характере зависимостей  $t_b(T_{гр})$ , рассчитанных с одностадийной кинетикой: значительно более резкий рост  $t_b$  вблизи критической температуры, но при этом достигаются относительно низкие максимальные значения  $t_b$  (не выше  $10^3 \text{ c}$ ); заметная выпуклость кривых  $t_b(T_{гр})$  вдали от критических температур.

<sup>2</sup>При моделировании терморазложения смесового ВВ на основе октогена ( $\rho = 1,86 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ ) теплофизические свойства инертной связки приравнялись к свойствам октогена.

<sup>3</sup>В расчетах с одностадийной кинетикой использовались параметры ВВ октоген (НМХ) из [6]:  $C = 0,26 \text{ кал/г}$ ;  $\lambda = 7 \cdot 10^{-4} \text{ кал/(с}\cdot\text{см}\cdot\text{К)}$ ;  $q = 500 \text{ кал/г}$ ;  $Z = 5 \cdot 10^{19} \text{ c}^{-1}$ ;  $E = 52,7 \cdot 10^3 \text{ кал/моль}$ .

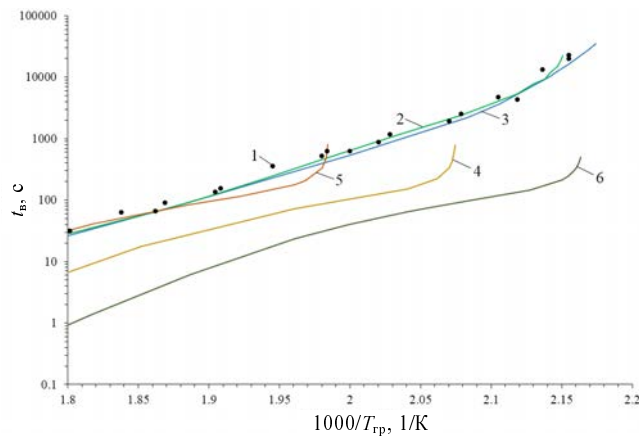


Рис. 1. Зависимость времени задержки воспламенения  $t_b$  от граничной температуры  $T_{гр}$  для сплошного шара диаметром 1,27 см (1/2 дюйма) из ВВ на основе октогена: 1 – эксперимент [2]<sup>4</sup>; 2 – расчет из [2]; 3 – расчет Логос Тепло (трехстадийная кинетика); 4, 5, 6 – расчеты Логос Тепло (одностадийная кинетика:  $Z_{\text{ном}}$  (4);  $0,1 \cdot Z_{\text{ном}}$  (5);  $10 \cdot Z_{\text{ном}}$  (6))

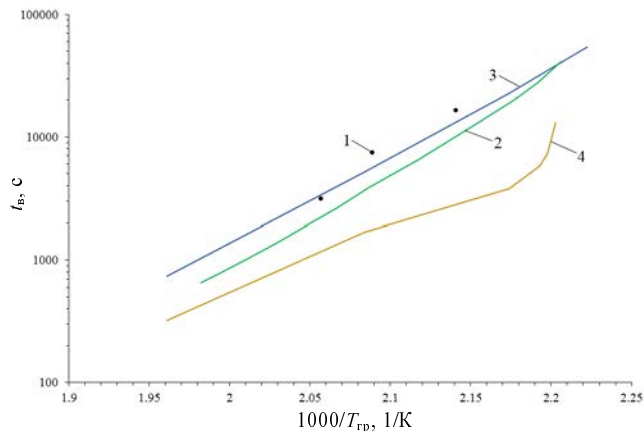


Рис. 2. Зависимость времени задержки воспламенения  $t_b$  от граничной температуры  $T_{гр}$  для сплошного цилиндра диаметром 5,08 см (2 дюйма) из ВВ на основе октогена: 1 – эксперимент [2]; 2 – расчет из [2]; 3 – расчет Логос Тепло (трехстадийная кинетика); 4 – расчет Логос Тепло (одностадийная кинетика)

Характерные зависимости профиля температуры  $T(r)$  и массовых концентраций продуктов терморазложения  $w_i(r)$  ( $i$  от 1 до 4) на последовательные моменты времени  $t$  для шара ВВ (диаметром 1,27 см) в условиях статического нагрева при  $T_{гр} = 240^\circ\text{C}$  представлены на рис. 3 и 4.

При временах  $t < 75 \text{ c}$  протекает стадия прогрева ВВ, при которой практически не происходит терморазложения ВВ (вещество ведет себя, как

<sup>4</sup>В опытах [2] погрешность определения времени задержки воспламенения  $t_b$  образцов ВВ составляла  $\pm 5\%$  (на графиках размер маркера экспериментальных данных соответствует значению погрешности).

инертное). По мере повышения температуры внутри ВВ возрастает теплоприход за счет химических реакций. В области, где теплоприход начинает превышать кондуктивный отток тепла, зарождается очаг воспламенения. При относительно высокой граничной температуре 240 °С (по сравнению с критической температурой  $\approx 191$  °С) очаг возникает вблизи внешней поверхности образца, что отражает резкий рост профиля температуры  $T(r)$ . При удалении от очага температура практически не меняется – «замораживается». Рост терморазложения в области очага приводит к быстрому снижению массовой концентрации исходного компонента  $w_1$ , при этом существенно увеличиваются массовые концентрации продуктов терморазложения  $w_2, \dots, w_4$ .

Выполненное с использованием трехстадийной кинетики терморазложения численное моделирование по программному модулю Логос Тепло опытов ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» ИФВ (Жбанова Н. Н., Фомичева Л. В., Хабаров И. П.), в которых исследовалось воспламенение сплошных цилиндров из

ВВ на основе октогена, помещенных в прочные стальные оболочки без свободного объема в условиях всестороннего динамического (линейного) нагрева с темпом  $\alpha = 0,2$  °С/мин и  $\alpha = 0,5$  °С/мин, показало хорошее согласие расчета с экспериментом (рис. 5).

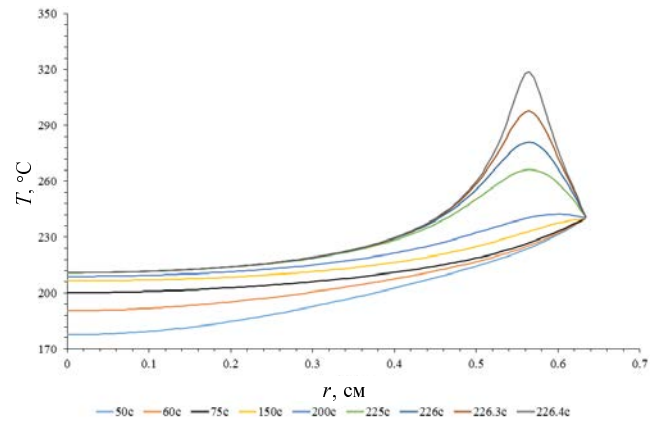


Рис. 3. Расчетные профили температуры  $T(r)$  на последовательные моменты времени  $t$  для шара ВВ (диаметром 1,27 см) в условиях статического нагрева при  $T_{гр} = 240$  °С

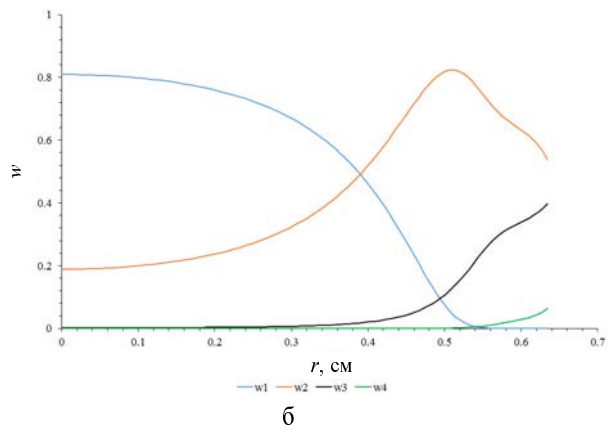
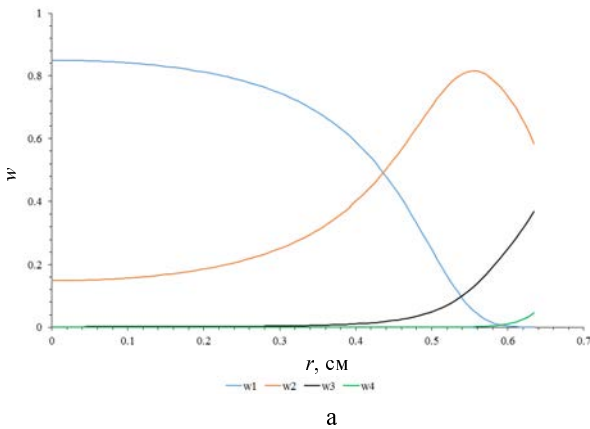


Рис. 4. Расчетные профили массовых концентраций продуктов терморазложения  $w_i(r)$  ( $i$  от 1 до 4) на последовательные моменты времени  $t$  для шара ВВ диаметром 1,27 см в условиях статического нагрева при  $T_{гр} = 240$  °С: а – 200 с; б – 226,4 с

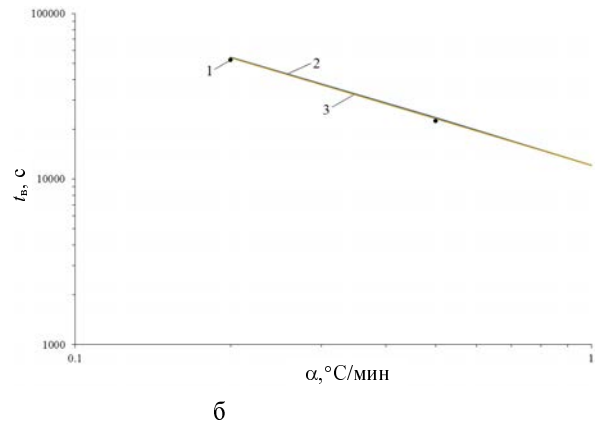
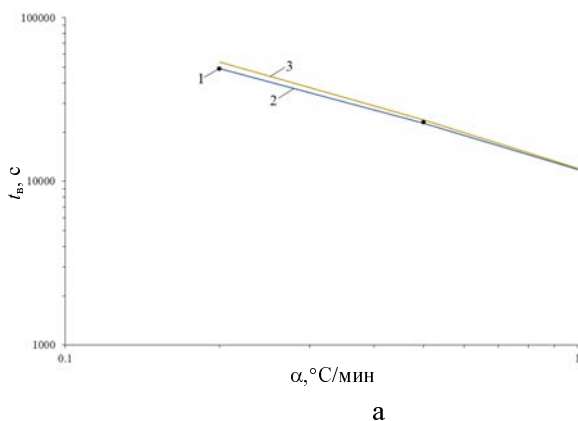


Рис. 5. Зависимости времени задержки воспламенения  $t_b$  от темпа нагрева  $\alpha$  для цилиндров из ВВ на основе октогена  $\varnothing 2 \times 4$  см (а) и  $\varnothing 5 \times 6$  см (б): 1 – эксперимент; 2 – расчет Логос Тепло (трехстадийная кинетика); 3 – расчет Логос Тепло (одностадийная кинетика)

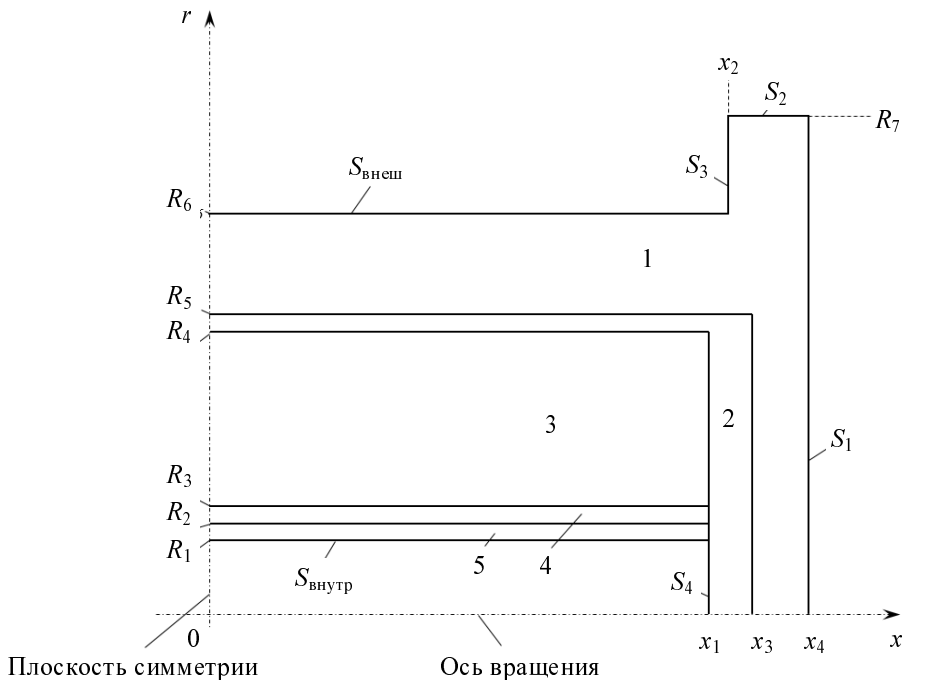
По результатам расчетов применение простой (одностадийной) кинетики терморазложения ВВ позволяет относительно хорошо описать экспериментальные значения времени задержки воспламенения. Это связано с тем, что при динамическом (линейном) нагреве температура поверхности сборки с ВВ однозначно связана со временем через граничное условие, а ошибка в определении температуры воспламенения по результатам расчетов, как правило, не слишком велика (даже при использовании простых моделей). Поэтому ошибка в определении  $t_v$  также невелика. Напротив, при статическом нагреве температура поверхности поддерживается постоянной, а значения времени до воспламенения в расчетах могут значительно отличаться в зависимости от используемой модели терморазложения ВВ.

Наряду с рассмотренными выше маломасштабными опытами с ВВ было выполнено моделирование крупномасштабных опытов [3] с тепловым взрывом цилиндрических образцов ВВ на основе октогена (масса  $\approx 7$  кг), подверженных нагреву с боковой поверхности в заданном режиме  $T_{\text{внеш}}(t)$ , где  $T_{\text{внеш}}(t)$  – температура внешней боковой поверхности сборки. В экспериментах исполь-

зовались как полые, так и сплошные цилиндры из ВВ. Схема экспериментальной сборки с ВВ в виде полого цилиндра представлена на рис. 6 (приведена  $\frac{1}{4}$  часть от всей осесимметричной сборки, которая задавалось в расчетах Логос Тепло в силу осесимметричного внешнего нагрева сборки в [3]).

Для реализации возникновения очага воспламенения полого цилиндра из ВВ вблизи внутренней поверхности при медленном нагреве в экспериментах со стороны внутренней поверхности создавался дополнительный подогрев с помощью нихромового нагревателя мощностью 35 Вт. В случае сплошных цилиндров области 4, 5 отсутствовали, а размеры  $R_4 = 7,49$ ,  $R_5 = 7,99$ ,  $R_6 = 9,99$  см ( $R_1 = R_2 = R_3 = 0$ ). Остальные размеры, соответствовали приведенным на рис. 6. В опытах измерялись временные зависимости температуры  $T(t)$  в точках установки термодатчиков, что позволило определить момент воспламенения ВВ и оценить расположение возникающего очага.

В расчетах Логос Тепло с трехстадийной кинетикой терморазложения ВВ использовались теплофизические параметры веществ экспериментальной сборки, представленные табл. 4–6.



Области: 1 – сталь, 2 – алюминий, 3 – ВВ, 4 – бронза, 5 – нагреватель (нихром).  
 Размеры, см:  $x_1 = 11,245$ ;  $x_2 = 11,845$ ;  $x_3 = 12,485$ ;  $x_4 = 13,725$ ;  $R_1 = 2,56$ ;  $R_2 = 2,61$ ;  
 $R_3 = 2,93$ ;  $R_4 = 7,62$ ;  $R_5 = 8,22$ ;  $R_6 = 10,15$ ;  $R_7 = 15,24$ .

Рис. 6. Схема экспериментальной сборки с ВВ в виде полого цилиндра

Т а б л и ц а 4

Теплофизические параметры  $C(T)$  и  $\lambda(T)$  для стали

$T, ^\circ\text{C}$	0	75	200	400	$\geq 600$
$C, \text{Дж}/(\text{кг}\cdot\text{К})$	439,6	502,4	565,2	628	711,8
$T, ^\circ\text{C}$	25	$\geq 800$			
$\lambda, \text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$	71,18	29,3			

Т а б л и ц а 5

Теплофизические параметры  $C(T)$  и  $\lambda(T)$  для алюминия

$T, ^\circ\text{C}$	0	$\geq 500$
$C, \text{Дж}/(\text{кг}\cdot\text{К})$	900	1130
$T, ^\circ\text{C}$	0	$\geq 400$
$\lambda, \text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$	226,1	221,9

Т а б л и ц а 6

Теплофизические параметры  $C(T)$  и  $\lambda(T)$  для бронзы

$T, ^\circ\text{C}$	0	200	$\geq 500$		
$C, \text{Дж}/(\text{кг}\cdot\text{К})$	397,7	489,9	527,5		
$T, ^\circ\text{C}$	0	100	200	300	$\geq 400$
$\lambda, \text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$	96,30	104,67	108,86	113,04	115,14

В опытах сборки подвергались медленному и быстрому нагреву. В расчетах эти режимы моделировались заданием на поверхности  $S_{\text{внеш}}$  соответствующих зависимостей температуры  $T_{\text{внеш}}(t)$ .

Для медленного нагрева:

$$T_{\text{внеш}}(t) = \begin{cases} T_0 & \text{при } t \leq t_1; \\ T_0 + \alpha_1(t - t_1) & \text{при } t_1 \leq t \leq t_2; \\ T_2 & \text{при } t_2 \leq t \leq t_3; \\ T_2 + \alpha_2(t - t_3) & \text{при } t \geq t_3, \end{cases} \quad (14)$$

где  $t_1 = 2700$  с;  $t_2 = 9900$  с;  $\alpha_1 = (T_2 - T_0)/(t_2 - t_1) = 1,875 \cdot 10^{-2}$  К/с;  $T_2 = T_0 + \alpha_1(t_2 - t_1) = 448$  К;  $t_3 = 38700$  с;  $\alpha_2 = 9,1667 \cdot 10^{-4}$  К/с ( $= 3,3$  К/ч).

Для быстрого нагрева:

$$T_{\text{внеш}}(t) = T_0 + \alpha t, \quad (15)$$

где  $\alpha = 2$  К/мин  $= 0,033333$  К/с.

Для остальных поверхностей сборки задавались следующие граничные условия:

- $S_{\text{внут}}, S_4$  – тепловой поток  $q = 0$  Вт/м<sup>2</sup> (теплоизолированные поверхности);

- $S_1, S_2, S_3$  – тепловой поток охлаждения, обусловленный излучением и естественной конвекцией,  $q = \varepsilon \sigma (T_n^4 - T_0^4) + A(T_n - T_0)^{4/3}$ , где  $\varepsilon = 0,2$  и  $A = 0,9$  Вт/(м<sup>2</sup>·К<sup>4/3</sup>) (коэффициент теплообмена) [7];  $T_0$  – температура окружающей среды совпадает с начальной температурой сборки (40 °С).

Расчеты с быстрым нагревом полого цилиндра проводились без тепловыделения в области 5 (см. рис. 6).

Результаты выполненных расчетов (координаты очага воспламенения  $x, r$  и время задержки воспламенения  $t_{\text{в}}$ ) и экспериментальные данные по времени воспламенения ВВ представлены в табл. 7.

Результаты расчетов с удовлетворительной точностью описывают все четыре эксперимента [3] по времени воспламенения (отклонение не превышает приблизительно 7 %).

Распределение поля температуры  $T(x, r)$  в экспериментальных сборках на момент воспламенения ВВ для различных условий внешнего нагрева представлено на рис. 7.

Т а б л и ц а 7

Результаты расчетов и экспериментов<sup>5</sup>

Геометрия	Режим нагрева	Результаты расчетов			Эксперимент по $t_{\text{в}}$ , мин	$\delta, \%$
		$x, \text{см}$	$r, \text{см}$	$t_{\text{в}}, \text{мин}$		
Полый цилиндр	Медленный	0,03	3,15	762	753	+1,2
Полый цилиндр	Быстрый	11,16	7,54	97	104	-6,7
Сплошной цилиндр	Медленный	10,54	6,90	958	915	+4,7
Сплошной цилиндр	Быстрый	11,20	7,38	97	100	-3,0

<sup>5</sup>Погрешность экспериментальных значений  $t_{\text{в}}$  составляет  $\approx \pm 7 \%$  [3].

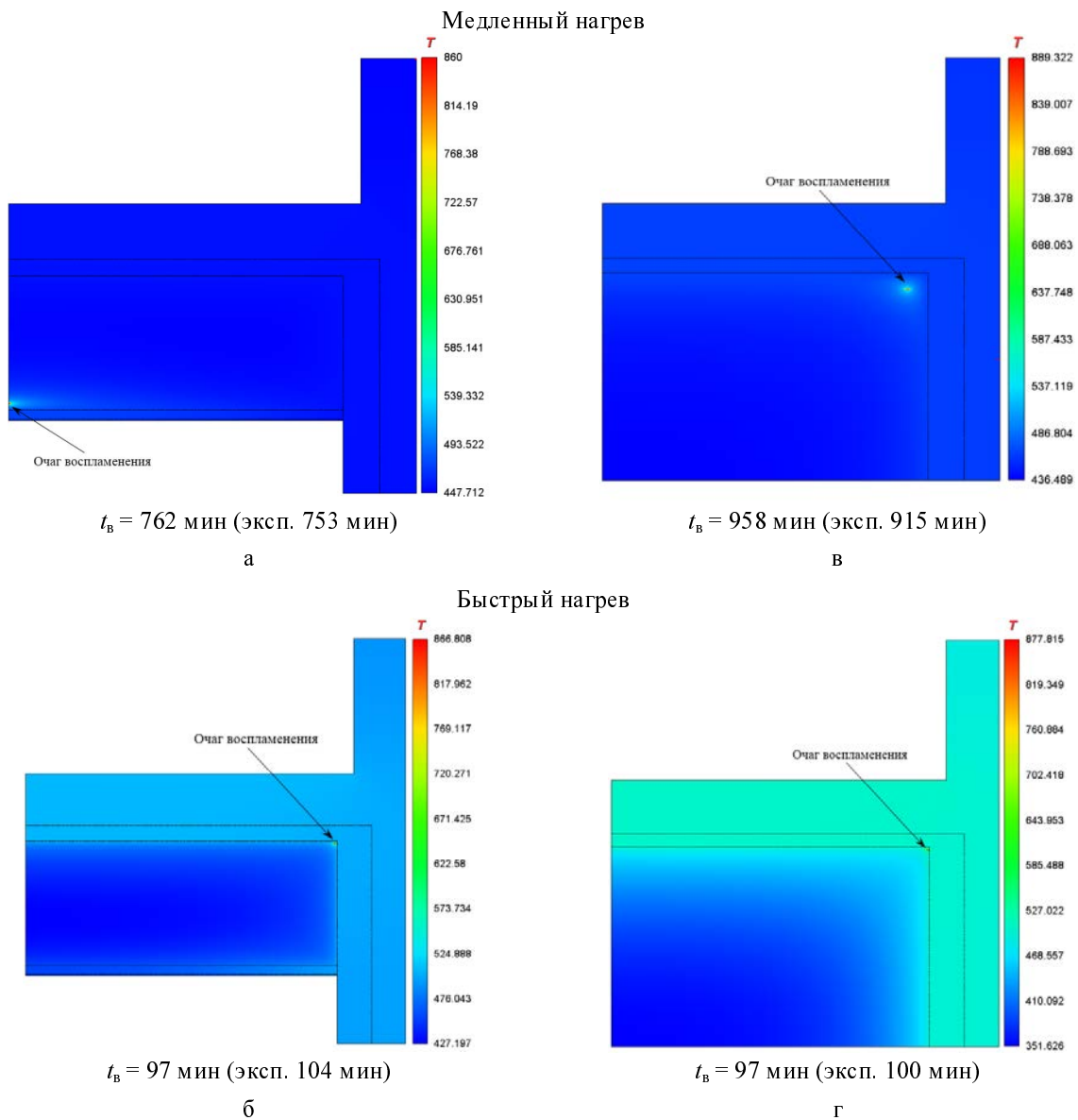


Рис. 7. Распределение поля температуры  $T(x,y)$ , К в сборках с ВВ на момент воспламенения  $t_B$  при различных условиях нагрева: а, б – полый цилиндр; в, г – сплошной цилиндр

При быстром нагреве сборки очаг воспламенения располагается вблизи внешней поверхности ВВ, при медленном нагреве ВВ воспламеняется в режиме теплового взрыва (или самовоспламенения) в толще. Кроме режима нагрева на расположение очага влияет конфигурация сборки и наличие внутренних источников подогрева. В сплошной сборке независимо от условий нагрева очаг возникает в верхнем углу цилиндра, что обусловлено нагревом ВВ с двух сторон (боковая поверхность и торец цилиндра). В случае полого цилиндра при медленном нагреве очаг располагается в плоскости симметрии сборки вблизи внутренней поверхности ВВ, что обеспечивается внутренним

подогревом ВВ. При отключении внутреннего подогрева существенно увеличивается время задержки воспламенения ВВ –  $t_B = 947$  мин (с подогревом  $t_B = 762$  мин) и изменяется положение очага: очаг возникает в окрестности верхнего угла цилиндра из ВВ. Выполненное исследование влияния темпа нагрева на положение очага показало, что только при увеличении темпа нагрева до  $\approx 8$  К/мин очаг воспламенения возникает на оси симметрии вблизи внешней поверхности (при этом время задержки воспламенения уменьшается до  $\approx 27$  мин 16 с). Замена алюминиевой оболочки, окружающей ВВ, на оболочки с меньшей теплопроводностью (стальная и бронзовая) для



снижения оттока тепла на периферию не изменяет ни время воспламенения, ни положение очага воспламенения.

В опыте с медленным нагревом полой сборки была определена временная зависимость температуры вблизи внутренней поверхности ВВ на оси симметрии сборки. Расчетная и экспериментальные зависимости  $T(t)$  хорошо согласуются друг с другом, что указывает на корректность используемой математической тепловой модели сборки, которая позволяет достаточно точно описать теплоперенос в рассматриваемом опыте (см. рис. 8).

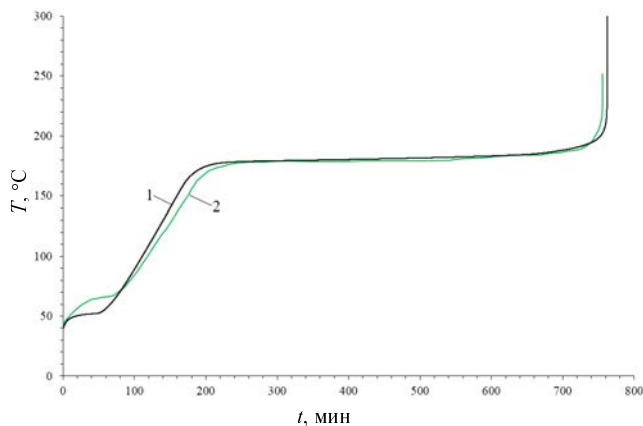


Рис. 8. Временная зависимость температуры  $T(t)$  в точке установки термодатчика<sup>6</sup> при медленном нагреве полого цилиндра: 1 – эксперимент [3]; расчет Логос Тепло (трехстадийная кинетика)

Определенное в расчете положение очага близко к месту установки термодатчика (отклонение приблизительно 2 мм), поэтому расчетная зависимость  $T(t)$  в очаге так же близка к экспериментальной.

Выполненное исследование влияния возможных экспериментальных разбросов температуры плато  $T_2$  (при медленном нагреве), которые согласно [3] составляют  $\pm 1,6$  °C, показало, что отклонение времени воспламенения ВВ от медианного значения колеблется от  $\approx -4$  до  $\approx +7$  %.

## Выводы

Модель воспламенения ВВ на основе октогена, реализованная в программном модуле Логос Тепло, позволяет с удовлетворительной точностью (в пределах погрешности эксперимента  $\approx 7$  %) описывать маломасштабные и крупномасштабные опыты с тепловым взрывом ВВ при различных режимах нагрева. Данная модель расширяет возможности программного модуля Логос Тепло и может быть полезной для получения надежных расчетных оценок поведения конструкций с ВВ в условиях внешнего нагрева.

## Список литературы

1. Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Зеленский Д. К. и др. Многофункциональный пакет программ ЛОГОС: физико-математические модели расчета задач аэро-, гидродинамики и теплопереноса // Препринт № 111. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2013.
2. McGuire R. R., Tarver C. M. Chemical Decomposition Models for Thermal Explosion of Confined HMX, TATB, RDX, and TNT Explosives // Seventh Symp. (Int.) on Detonation. 1981. P. 56–64.
3. Chidester S. K., Tarver C. M., Green L. G., and Urtiew P. A. On the Violence of Thermal Explosion in Solid Explosives // Comb. And Flame 110. 1997. P. 264–280.
4. Кабаев А. А., Цыкин С. В. Численное моделирование воспламенения ВВ с учетом многостадийной кинетики разложения // Сборник докладов научно-технической конференции «Молодежь в науке». Саров, 11–13 марта, 2002. С. 105–111.
5. Вильямс Ф. Теория горения. М.: Наука, 1971.
6. Мейдер Ч. Численное моделирование детонации. М.: Мир, 1985.
7. Кутателадзе С. С. и Боришанский В. М. Справочник по теплопередаче. М.: Госэнергоиздат, 1959.

Статья поступила в редакцию 08.11.2021.

<sup>6</sup>В опыте термодатчик располагался на внутренней поверхности ВВ непосредственно под очагом воспламенения.