МАШИНОЗНАВСТВО

УДК 662.2

А.Воєводка, д.ф.н.
Сілезький Технічний університет, Польща
Т.В. Косенко, аспір.
Національний технічний університет України "КПІ"

АНАЛІЗ МЕТОДІВ ОБЧИСЛЕННЯ ЕКСПЛУАТАЦІЙНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОМИСЛОВИХ ВИБУХОВИХ МАТЕРІАЛІВ

Розглянуто найважливіші методи обчислення експлуатаційних характеристик (термодинамічних параметрів) вибухових матеріалів, як високоенергетичних (ідеальних), так і промислових (неідеальних). Запропоновано обчислення експлуатаційних характеристик промислових вибухових матеріалів із застосуванням моделі на основі віріального рівняння стану газу.

Вступ

Актуальною проблемою з погляду теорії і практики застосування вибухових речовин (ВР) є можливість передбачення експлуатаційних характеристик та їх зв'язок з відомими величинами – хімічним складом ВР, його щільністю та ін. Практика ставить жорсткі вимоги до значень термодинамічних властивостей, детонаційних характеристик вибухових і балістичних ВР (експлуатаційних характеристик).

Залежно від мети і умов використання вибухова речовина мусить мати відповідний енергетичний ефект, здатність до виконання роботи та ін. Важливі також економічні аспекти – вибравши відповідним чином ВР, можна значно знизити кошти досягнення бажаної мети. В зв'язку з цим розпочато створення принципово нових типів ВР або модифікацію існуючих для задоволення поставлених перед ВР вимог. Для цього придатні обчислювальні методи, як емпіричні, що базуються на вихідних властивостях ВР, так і класичні, що спираються на вихідні властивості ВР і на моделі детонації. Запропонована праця стосується вибраних класичних методів.

Методи обчислення характеристик вибухових матеріалів

Розрахунок параметрів вибухового перетворення ВР є справою складною, а отримані результати не цілком узгоджуються з відповідними експериментальними значеннями. Більшість алгоритмів обчислення та комп'ютерних програм, що ґрунтуються на них, описаних в літературі, відносно складні [1–2]. У цих програмах використовуються емпіричні або напівемпіричні рівняння стану газу. У той же час розкладове рівняння вміщує кілька десятків продуктів детонації (ПД).

Найчастіше застосовуються такі рівняння стану:

1. Рівняння Бекера-Кістяковського-Вільсона (BKW) [3–4]:

$$\frac{pV}{RT} = 1 + xe^{\beta \cdot x},$$

де

$$x = \frac{k\sum(x_i k_i)}{V(T+\theta)^{\alpha}};$$

α, β, k, θ – константи, визначені для різних типів ВР;

k_i – геометричний коефіцієнт постійної величини для і-го ПД;

x_i – частина моля і-го ПД.

Емпіричні константи і геометричні коефіцієнти рівняння BKW запропоновані: Мадером (BKW-класичне), Фінгером (BKW-R), Хоббсом і Байєром (BKW-S), групою працівників Ліверморської Національної Лабораторії в програмі CHEETAH (BKW-C) [3–11].

Рівняння BKW має такі недоліки [12–14]:

- необхідність емпіричного добору коефіцієнтів α, β, k, θ на основі нормальних параметрів детонаційних хвиль, що суперечить його ідеї побудови рівняння стану ПД на підставі незалежних даних;

- отримання надто високого тиску ПД при їх ізентропійному розвантаженні, що не узгоджується з дійсним станом;
- неможливість точного описання властивостей ПД при великих щільностях і низьких температурах.

2. Рівняння Джонсона-Уілкінса-Лі [JWL] належить до групи рівнянь, в конструюванні яких не аналізується склад ПД, лише постулюється вид рівняння і встановлюються його невідомі коефіцієнти за допомогою експериментальних даних [1]:

$$p = Ae^{-R_1V} + Be^{-R_2V} + CV^{(-1-\omega)}.$$

За припущення, що коефіцієнт Грюнайзена в усій області змін тиску постійний і дорівнює ω, а співвідношення

$$\frac{dE}{dv} = -p,$$

отримується рівняння стану у вигляді [1]:

$$p = A\left(1 - \frac{\omega}{R_1V}\right)e^{-R_1V} + B\left(1 - \frac{\omega}{R_2V}\right)e^{-R_2V} + \frac{\omega E}{V}.$$

Постійні A, B, C, R_1, R_2 і ω визначаються емпірично, наприклад, за допомогою циліндричного тесту [15–21].

До недоліків рівняння JWL відносять:

- необхідність добору величини коефіцієнтів рівняння стану ПД окремо для кожної ВР;
- діапазон достовірності отриманого рівняння стану ПД обмежується областю, з якої взято експериментальні дані для визначення його параметрів.

3. Рівняння Абля (модифіковане рівняння Ван-дер-Ваальса) [1–2, 22–24]:

$$p[V - \alpha(V)] = nRT,$$

де $\alpha(V)$ – коволюм (враховує вплив дійсного об'єму молекул ПД), є функцією, що визначається експериментально.

В розробленому алгоритмі [25], що спирається на рівняння стану Ван-дер-Ваальса, прийнято 18 ПД і передбачено 17 рівноважних рівнянь між ПД. Програма обчислює експлуатаційні характеристики ВР типу C-H-O-N-Al.

4. Рівняння Якобса-Купервайта-Цвіслера (JCZ-3) являє собою розвиток рівняння Абля з врахуванням теорії LJD (Леонарда-Джонса-Девоншіра) і має вигляд [26,27]:

$$p = \frac{G(V,T,\varphi)nRT}{V} + p_0(V,\varphi),$$

де G є функцією Грюнайзена, що визначається за допомогою теорії LJD. Коефіцієнти при визначенні функції Грюнайзена встановлюються в експериментах з розпорошення атомів, обчислюються на підставі експериментально встановлених ударних адіабат.

5. Віріальні рівняння.

Стан реальних газів можна точно описати рівняннями у вигляді поліномів, у яких молярний об'єм чи тиск є незалежними змінними (т. зв. віріальні рівняння) [1–2, 12, 26–30].

Рівняння Камерлінга-Оннеса – це головне віріальне рівняння, що застосовується у вигляді [1–2]:

$$\frac{pV}{RT} = 1 + \frac{B(t)}{V} + \frac{C(t)}{V^2} + \frac{D(t)}{V^3} \cdots,$$

де B, C, D – віріальні коефіцієнти (другий, третій...).

Значення віріальних коефіцієнтів залежить від типу газу та температури. Їх описують формулами:

$$B = b_0 + b_1T + b_2T^2 +$$

$$C = c_0 + c_1T + c_2T^2 +$$

До рівнянь віріального типу належить рівняння Хіршфельда-Розевера [2,28]:

$$\frac{pV}{nRT} = 1 + \frac{b}{v} + 0{,}625\left(\frac{b_0}{v}\right)^2 + 0{,}2869\left(\frac{b_0}{v}\right)^3 + 0{,}1928\left(\frac{b_0}{v}\right)^4,$$

де b, b_0 – постійні величини, що залежать від типу газів.

Віріальні рівняння надаються до опису як чистих газів, так і їх сумішей [28]. Точність і область тиску зростають з числом віріальних коефіцієнтів, що враховують відхилення від стану ідеального газу. Важливою перевагою віріального рівняння є можливість обчислення наближених значень віріальних коефіцієнтів теоретичним шляхом, оскільки кожний коефіцієнт можна пов'язати з потенціальною енергією міжчасткових взаємодій. В області малих тисків відхилення газу від ідеального стану зумовлюються подвійними стисканнями часток, коли вистачить врахувати лише віріальний коефіцієнт B(T). В областях вищих тисків більшого значення набувають стискання трьох і більше часток.

В області температур від 2000 К до 5000 К другий віріальний коефіцієнт піддається невеликим змінам і звідси можна припустити, що він не залежить від температури [28].

Алгоритм, що стосується рівняння Хіршфельда-Розевера, дозволяє обчислити експлуатаційні характеристики промислових ВР з добрими результатами. У той же час визначення характеристик ідеальних ВР з допомогою цього рівняння дає значні помилки [1].

6. Рівняння стану ідеального газу:

$$pV = nRT$$

точне в області високих температур і низьких тисків. Стан ПД можна описати моделлю ідеального газу, якщо потенціальна енергія взаємодії часток набагато менша ніж кінетична [1–2, 31–33] . Ці умови виконують ПД достатньо малої щільності, наприклад такі, що виникають під час детонації газових вибухових сумішей [1–2].

Найбільш спрощений метод обчислення рівноважного стану пропонує галузева норма, що застосовується для визначення експлуатаційних параметрів гірничих ВР [31].

Рівняння розкладу ВР, записане у вигляді:

$$C_C H_H O_O N_N Al_{Al} Ca_{Ca} K_K Na_{Na} Cl_{Cl} S_S Ba_{Ba} = n_1 CO_2 + n_2 CO + n_3 H_2O + n_4 N_2 + n_5 O_2 +$$
$$+ n_6 Al_2O_3 + n_7 CaO + n_8 KCl + n_9 K_2CO_3 + n_{10} NaCl + n_{11} Na_2CO_3 + n_{12} HCl + n_{13} SO_2 + n_{14} BaO$$

визначається залежно від величини кисневого балансу. Існують два варіанти обчислення: для негативного (до –10 %) і позитивного кисневого балансу.

В обох варіантах дається система рівнянь, що передбачає інші продукти розкладу. В метод обчислення закладено незворотність усіх реакцій; система рівнянь не вміщує рівноважних рівнянь [31]. Додатковим дуже важливим спрощенням є трактування газової суміші ПД як ідеального газу; об'єм ПД обчислюється за допомогою рівняння Клапейрона. Ця методика [31] при визначенні таких експлуатаційних характеристик ПВР, як тиск чи ідеальна робота вибуху, дає результати з помилкою навіть до кількасот відсотків.

Інші алгоритми обчислення стану ПД за допомогою рівнянь стану ідеального газу наведено в працях Келера і Майєра [32] та Матсуі [33]. Алгоритм [32] стосується тільки вибухових матеріалів типу C-H-O-N і враховує лише 6 ПД та 3 рівноважних рівняння між ПД. В той же час в праці [33] закладено наявність 11 ПД і враховується 7 рівноважних рівнянь між ПД.

Обговорення методів

Рівняння BKW, JWL та JCZ-3 придатні, з урахуванням припущених обмежень, для обчислення експлуатаційних характеристик низькоенергетичних ВР, особливо типу C-H-O-N. Вони вимагають точних емпіричних параметрів, а придатність побудованого рівняння стану ПД обмежується областю, з якої взяті експериментальні дані.

Алгоритм обчислення з використанням модифікованого рівняння Ван-дер-Ваальса (Нобля-Абля) стосується ВР типу C-H-O-N-Al і не враховує багатьох його складових.

Найбільш спрощений метод обчислення подає праця [31], в якій тиск вибуху і величини, пов'язані з ним, визначаються з точністю до кількасот процентів.

Методи із застосуванням віріального рівняння стану теоретично добре обґрунтовані, достатньо точні для промислових вибухових матеріалів і не потребують складних калібрувальних експериментів.

Порівняння результатів обчислень тиску і температури в точці Чепмена-Жуге для салетролу з густиною 0,8 г/см^3, що вміщує 6 % дизпалива, виконаних за різними алгоритмами, призводить до наступних якісних висновків [2, 12]:

тиск: *BKW > JCZ-3*
температура: *JCZ-3 > BKW.*

В той же час порівняння результатів обчислень та вимірювань вмісту токсичних (CO; NO) та шкідливих (CO_2) компонентів вибухових газів двох типів салетролу подано в табл. 1.

Таблиця 1

Порівняння експериментальних і розрахункових даних про вміст вибраних ПД для салетролів густиною 0,8 г/см³ [12]

Вибухова речовина	Продукт детонації	Вміст газів, моль/кг ВР				
		Експеримент		Обчислення		
		Кроушоу Джонс	Експеримен-тальна штольня	BKW	Віріальне рівняння	JCZ-3
Салетрол 94/6	CO_2	2,667	4,700	3,619	3,530	3,845
	CO	0,699	0,389	0,674	0,761	0,448
	NO	0,000	0,054	0,004	0,053	0,004
Салетрол 97/3	CO	2,417	0,222	0,000	0,002	0,000
	NO	0,639	0,583	0,172	0,888	0,229
	O_2	0,000	2,555	2,780	2,400	2,751

Аналіз даних показує, що вміст важливих ПД при вибуху салетролу, обчислений за віріальним рівнянням, дає найбільш наближені до експериментальних даних зі штольні.

Підсумок

Прийняття рівняння стану, яке неточно описує продукти детонації вибухових речовин та відсутність рівноважних рівнянь [31], призводить до значних помилок такого методу обчислення. Можна застосовувати в розрахунках емпірічні рівняння з великим числом коефіцієнтів, що описують стан ПД в широкому діапазоні тисків (BKW, JWL,JCZ-3), або прості віріальні рівняння, які добре описують стан ПД, особливо для високоенергетичних ВР.

ЛІТЕРАТУРА:

1. *E.Wlodarczyk.* Wstep do mechaniki wybuchu. – Warszawa: PWN, 1994.
2. *P.A. Persson, R.Holmberg, J.Lee.* Rock Blasting and Explosives Engineering. – CRC Press. Boca Raton, 1994.
3. *C.L. Mader.* Detonation Performance Calculations Using the Kistiakowsky-Wilson Equation of State/ Report W-7405, University of California, 1961.
4. *C.L. Mader.* Numerical Modeling of Detonations. – Berkeley-Los Angeles: University of California Press, 1979.
5. *M. Suceska.* Calculation of the Detonation Properties of C-H-N-O Explosives // PEP, 1991. – 197. – № 4.
6. *L.E. Fried, P.C. Souers.* BKWC: An Empirical BKW Parametrization Based on Cylinder Test Data // PEP, 1996. – 215. – № 4.
7. *C.L. Greenlee, P.B. Butler.* Influence of Product Species Selection on Thermochemical Equilibrium Calculations. Part 1: Energetic Materials // PEP, 1997. – 15. – № 1.
8. *M.Vaulleria, A.Espagnacq, B.Blaise.* Reparametrization of the BKW Equation of State for the Triazoles and Comparison of the Detonation Properties of HMX, TNMA and NTO by means of Ab-Initio and Semiempirical Calculations // PEP, 1998. – 73. – № 2.
9. *V.Swaminathan, S.Rajagopalan.* On the Detonation Characteristics of CHNO-Type Condensed Explosives. A Parameter Study // PEP, 1982. – 31. – № 2.
10. *J.M. Short, H.F. Eccleston, E.E. Baroody, K.F. Mueller, M.J. Kamlet.* The Chemistry of Detonations. IX. Some Observations Regarding a Computer Based Parametric Study of Detonation Characteristics of C-H-N-O Explosives // PEP, 1983. – 19. – № 1.
11. *V.Swaminathan, S.Rajagopalan.* Comments to the Paper entitled "The Chemistry of Detonations: IX. Some Observations Regarding a Computer Based Parametric Study of Detonation Characteristics of C-H-N-O Explosives" by J.M. Short et al // PEP, 1983. – 23. – № 1.