

КОМПЬЮТЕРНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА

УДК 53.081.7

Ю. А. Комиссаров, Дам Куанг Шанг

КОМПЬЮТЕРНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДЕТОНАЦИОННЫХ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПРОМЫШЛЕННЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ

Предложена математическая модель идеального процесса детонации твердых взрывчатых веществ, на основе которой разработано программное обеспечение DETO 1.0. Создана база данных термодинамических свойств компонентов взрывчатых веществ и продуктов детонации. Программное обеспечение позволяет предсказать детонационные параметры (скорость детонации и давление в точке Чепмена – Жуге) промышленных взрывчатых веществ, что представляет особый интерес при поиске и исследовании новых взрывчатых веществ. Преимущества программного обеспечения DETO 1.0: простой интерфейс; база данных в виде термодинамических свойств компонентов взрывчатых веществ и продуктов детонации; автоматический ввод исходных данных (термодинамические свойства 65 компонентов взрывчатых веществ и 31 продукта детонации); легкость использования программного обеспечения. Результаты расчета параметров взрывчатых веществ с использованием DETO 1.0 и программного обеспечения Cheetah и Vixen-I с достаточной степенью точности совпадают с параметрами промышленных взрывчатых веществ E682-a, E682-b и E682 с алюминием, определенными экспериментально. Алгоритм DETO 1.0 позволяет дополнять и развивать программное обеспечение, разрабатываемое другими производителями для моделирования процесса инициирования, детонации и работоспособности промышленных взрывчатых веществ.

Ключевые слова: промышленные взрывчатые вещества, продукты детонации, детонация, компьютерное обеспечение, база данных.

Введение

В настоящее время во многих прикладных научных областях используется компьютерное моделирование [1], которое не только позволяет экономить время и усилия, но и является единственным выходом в тех случаях, когда проводить эксперимент на промышленных объектах либо невозможно, либо размер объекта исследования слишком мал. Особую актуальность компьютерное моделирование приобретает при исследованиях, сопряженных с риском для жизни людей, например при создании новых взрывчатых веществ. Во многих исследовательских центрах и компаниях в настоящее время для определения детонационных характеристик взрывчатых веществ, в том числе промышленных, используются компьютерные программы с идеальной моделью детонации взрывчатых веществ (Cheetah [2]) по уравнениям состояния BKW (Becker – Kistiakowsky – Wilson) или JWЛ (Jones – Wilkins – Lee) для неидеальной модели детонации (Vixen-I [3]).

Однако эти компьютерные программы не являются коммерческими, купить их невозможно, поэтому разработка программного обеспечения для расчета детонационных параметров взрывчатых веществ является необходимой и актуальной для институтов, изучающих их свойства.

Математическая модель процесса детонации твердых взрывчатых веществ

По гидродинамической теории детонация является волновым процессом в реагирующей среде (реакция взрывчатого превращения), распространение которого обусловливается ударными волнами.

На рис. 1 приведены кривые Гюгонио, на которых P_0 и V_0 – давление и удельный объем твердого взрывчатого вещества в начальный момент времени. При распространении ударных волн по массе взрывчатого вещества давление увеличивается до P_1 , а удельный объем вещества снижается до V_1 (адиабатическое сжатие Гюгонио) и одновременно происходит химическая реакция. По окончании химической реакции давление и удельный объем продуктов детонации принимают значения P_2 , V_2 на адиабате Гюгонио для продуктов реакции. Затем продукты реакции расширяются (волна Тейлора) от точки (P_2, V_2) до давления окружающей среды.

Для удовлетворения условия стационарной детонации (когда скорость ударного фронта равна скорости задней границы (зоны реакции) (рис. 2)), точки (P_0, V_0) , (P_1, V_1) и (P_2, V_2) должны находиться на одной прямой (прямая Релея).

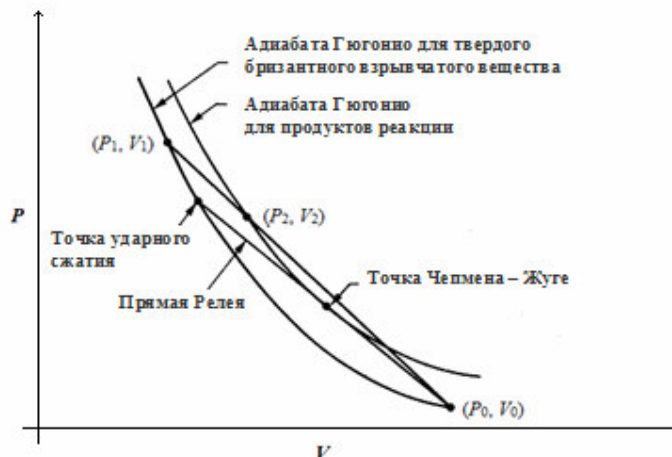


Рис. 1. Кривые Гюгонио твердого бризантного взрывчатого вещества и продуктов его детонации

На рис. 2 представлена структура детонационной волны.



Рис. 2. Структура детонационной волны

Задняя граница зоны реакции расположена в точке 2, скорость которой определяется по формуле

$$D = f(P) = V_0' \sqrt{\frac{P - P_0}{V_0' - V_r}}, \quad (1)$$

где P_0 – давление окружающей среды, Па; V_0 и V_r – удельный объем взрывчатого вещества и продуктов детонации, $\text{см}^3/\text{г}$, соответственно.

Гипотеза Чепмена – Жуге (Cherpan – Jouget (CJ)) гласит: для плоской детонационной волны (идеальная стационарная детонация) прямая Релея является касательной к адиабате Гюгонио продуктов детонации. В точке касания (точка Чепмена – Жуге) выполняется условие Чепмена – Жуге:

$$D - U = a_2,$$

где U – массовая скорость частиц продуктов детонации; a_2 – скорость звука в детонационных продуктах.

Так как давление на фронте детонационной волны очень высокое, то для описания состояния продуктов детонации необходимо использовать уравнение состояния. Для неидеальной модели [3] условие Чепмена – Жуге не выполняется.

При идеальной [2] и неидеальной моделях [3] используется уравнение состояния реальных газов.

Таким образом, система уравнений, описывающих процесс стационарной детонации, имеет следующий вид:

– уравнение переноса массы:

$$D^2 = V_0^2 \frac{P_2 - P_0}{V_0 - V_2};$$

– уравнение сохранения количества движения:

$$U^2 = (P_2 - P_0)(V_0 - V_2);$$

– уравнение сохранения энергии:

$$E_2 - E_0 = \frac{1}{2}(P_2 + P_0)(V_0 - V_2),$$

где E_0 , E_2 – удельная внутренняя энергия твердых взрывчатых веществ в точке (P_0, V_0) и продуктов детонации в точке (P_2, V_2) . Для адиабаты твердого бризантного взрывчатого вещества (см. рис. 1) в уравнении сохранения энергии индекс «2» заменяется индексом «1»:

$$E_1 - E_0 = \frac{1}{2}(P_1 + P_0)(V_0 - V_1);$$

– уравнение состояния продуктов детонации:

$$f(P_2, V_2, T) = 0.$$

Программное обеспечение и база данных термодинамических свойств компонентов, входящих в состав взрывчатых веществ и продуктов детонации

Учитывая актуальность вышеобозначенной проблемы, мы разработали программное обеспечение DETO 1.0 и базу данных термодинамических свойств компонентов взрывчатых веществ и продуктов детонации.

Функции компьютерного (программного) обеспечения DETO 1.0. Решение системы вышеприведенных уравнений позволит определить параметры для стационарной детонационной волны. Нами использовался алгоритм, приведенный на рис. 3 [4].

Блок А представляет собой алгоритм определения температуры T при известном давлении P по уравнению сохранения энергии:

$$E_{\text{total}} - E_0 - \frac{1}{2}(P + P_0)(V_0' - V_r) n_{\text{spn}} = 0,$$

где E_{total} – внутренняя энергия; E_0 – стандартная теплота образования при температуре 0 К; n_{spo} – число молей продуктов детонации.

Внутренняя энергия E_{total} получена по методу [5] с использованием:

а) уравнения состояния ВКВ с коэффициентами типа ВКВР [2] для газообразных продуктов:

$$\frac{pV_g}{RT} = 1 + xe^{\beta x}, \quad (2)$$

где $x = \frac{K}{V_g(T + \theta)^\alpha}$; $K = \chi \sum_i n_i k_i$; n_i , k_i – мольные доли и индивидуальные геометрические коволюмы газообразных продуктов детонации; α , β , χ и θ – экспериментальные константы

(коэффициенты ВКWR: $\alpha = 0,5$; $\beta = 0,176$; $\chi = 11,8$; $\theta = 1850$; p , V_g , T – давление, объем газов и температура продуктов детонации соответственно);

б) уравнения состояния Коуэна для твердого графита [6]:

$$p = p_1(V_s) + a(V_s)T_v + b(V_s)T_v^2, \quad (3)$$

где

$$p_1(V_s) = -2,467 + 6,769\eta - 6,956\eta^2 + 3,040\eta^3 - 0,3869\eta^4;$$

$$a(V_s) = -0,2267 + 0,2712\eta;$$

$$b(V_s) = 0,08316 - 0,07804\eta^{-1} + 0,03068\eta^{-2};$$

$\eta = \frac{V_s^0(T^0)}{V_s} = \frac{\rho}{\rho_0}$ – степень сжатия твердого графита по отношению к его нормальной плотности в кристаллическом виде; $\rho_0 = 2,25 \text{ г/см}^3$;

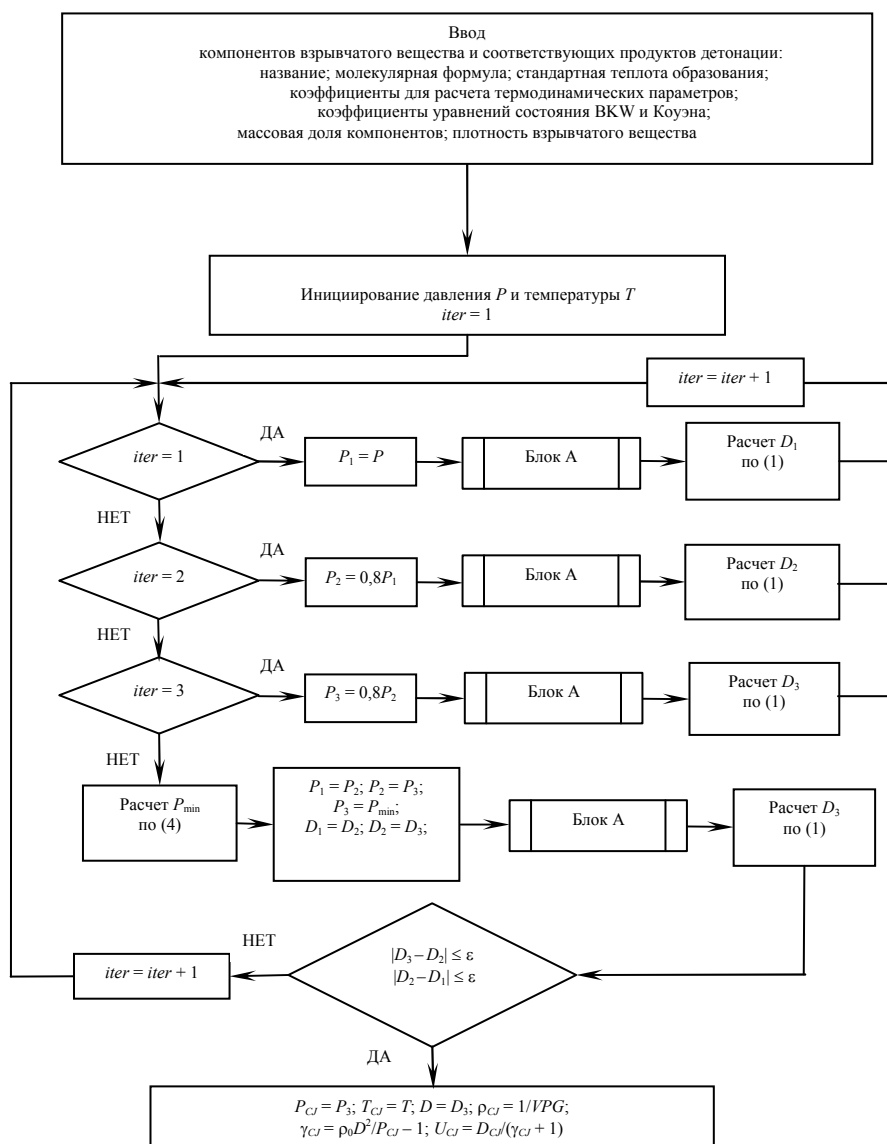


Рис. 3. Блок-схема алгоритма расчета детонационных характеристик взрывчатого вещества

По уравнению (3) определяем значение p в мегабарах при температуре T_v в электронвольтах, что соответствует 11605,6 К. Уравнение состояния Коуэна удовлетворяется при следующих условиях: $0 < T_v < 2$ и $0,95 < \eta < 2,5$.

Условие Чепмена – Жуге выполняется нахождением минимума (P_{\min}, D_{\min}) функции

$$D = f(P) = V_0' \sqrt{\frac{P - P_0}{V_0' - V_r}}$$

с использованием итерационного метода для трех пар значений (P, D). Значение давления P_{\min} в точке Чепмена – Жуге определяется по формуле

$$P_{\min} = \frac{1}{2} \frac{P_1^2 (D_3 - D_2) + P_2^2 (D_1 - D_3) + P_3^2 (D_2 - D_1)}{P_1 (D_3 - D_2) + P_2 (D_1 - D_3) + P_3 (D_2 - D_1)}. \quad (4)$$

Однако использование алгоритма [2] для создания новых промышленных взрывчатых веществ становится невозможным, т. к., во-первых, этот алгоритм позволяет рассчитать детонационные характеристики только для четырех элементов (С, Н, О и N), и, во-вторых, ввод исходных данных, включающих термодинамические свойства компонентов, выполняется вручную.

С учетом вышеперечисленных недостатков мы дополнили программное обеспечение DETO 1.0 на языке Visual Basic.Net 2008, что обеспечило его следующие преимущества:

- простой интерфейс;
- новая база данных в виде термодинамических свойств компонентов, составляющих взрывчатое вещество и продукты детонации, для расчета энтальпии энтропии, свободной энергии и т. д.;
- автоматический ввод исходных данных термодинамических свойств компонентов взрывчатого вещества (С, Н, О, N, Cl, F, Al, Na, Ca, Si и т. д. до 65) и продуктов детонации (до 31) на основе выбранного состава взрывчатого вещества;
- автоматическое обнаружение химических элементов, числа атомов в молекулярной формуле компонентов взрывчатого вещества и определение продуктов детонации.

База данных термодинамических свойств взрывчатых веществ и продуктов детонации.

База данных, включающая в себя 2 таблицы: таблицу термодинамических свойств взрывчатого вещества (табл. 1) и продуктов детонации (табл. 2)¹, создана с помощью СУБД MS Access 2007 и соединена с программным обеспечением DETO 1.0. Когда пользователь выбирает название взрывчатого вещества и состав его компонентов, автоматически рассчитываются их термодинамические свойства, анализируется состав химических элементов и выводятся соответствующие продукты детонации. Базу данных можно обновить по требованию пользователя.

Следует отметить, что формулы в таблицах подобны традиционным химическим формулам, но символы элементов с числом атома находятся на расстоянии одного пробела друг от друга. Если число атомов элемента равно единице, то за символом этого элемента надо писать цифру 1. Например, молекулярная формула гексогена (RDX) будет иметь следующий вид: C3 H6 N6 O6 вместо C₃H₆O₆N₆, алюминия – Al1 вместо Al.

Таблица 1

Структура таблицы термодинамических свойств компонентов взрывчатых веществ

Название	Формула	Энтальпия* H , кДж/кг	Мольная масса	Кислородный баланс, %
Алюминий	Al1	0	26,982	-89
Нитрат аммония	H4 N2 O3	-4082,4	80,043	20
2,4,6-Тринитротолуол	C7 H5 N3 O6	-26,5	227,133	-74

* Стандартная теплота образования.

В таблице термодинамических свойств компонентов продуктов детонации (табл. 2) символ в скобках указывает на состояние вещества – газообразное (g) или твердое (s); H^0 и H_{298} – стандартная теплота образования при температуре 0 и 298 К; AH, BH, CH, DH, EH, ICH – коэффициенты для расчета энтальпии, энтропии и свободной энергии при идеальном состоянии, по-

¹ В оригинальном программном обеспечении таблицы представлены на английском языке.

лученные из табличных данных [7] по энтальпии ($H^0 - H_{298}^0$) в виде уравнения регрессии полинома 4-й степени [8]; *COVOL* – коволом газообразных продуктов детонации, применяющийся в уравнении состояния ВКВ (2); V_0 – удельный объем твердых веществ, использующийся в уравнении (3) Коуэна.

Таблица 2

Структура таблицы термодинамических свойств компонентов продуктов детонации

Формула	Название	Энтальпия H^0 , кДж/мол	Энтальпия H_{298}^0 , кДж/мол	Мольная масса	AH
H2 O1	Вода (g)	-238,913	-241,814	18,01528	-8937,32
H2	Водород, двухатомный (g)	0	0	2,01588	-8019,61
Al2 O3	Оксид алюминия (s)	-1663,563	-1675,700	101,961	-10267,15

(...)

BH	CH	DH	EH	ICH	$COVOL$	V_0 , см ³ /г
27,001	0,009116	-122E-8	65E-12	29,717	250	–
26,446	0,00228	-12E-8	116E-14	-21,344	180	–
162,93	-12,27E-6	19,54E-10	-1,14E-13	-921,95	–	0,2522

Формулы для расчета энтальпии, энтропии и свободной энергии:

$$H^0 - H_{298}^0 = AH + BH \cdot T + CH \cdot T^2 + DH \cdot T^3 + EH \cdot T^4;$$

$$S^0 = ICH + BH \cdot \ln T + 2CH \cdot T + \frac{3}{2}DH \cdot T^2 + \frac{4}{3}EH \cdot T^3;$$

$$-\frac{(E^0 - H_{298}^0)}{T} = \frac{S^0 T - (H^0 - H_{298}^0)}{T} = -\frac{AH}{T} + ICH + BH(\ln T - 1) +$$

$$+ CH \cdot T + \frac{1}{2}DH \cdot T^2 + \frac{1}{3}EH \cdot T^3,$$

где F^0 – свободная энергия (при расчетах используется зависимость $(F^0 - H_{298}^0)/T$); E^0 – внутренняя энергия.

Использование программного обеспечения DETO 1.0 для определения детонационных параметров промышленных взрывчатых веществ

Для оценки точности расчета с использованием DETO 1.0 при определении детонационных характеристик промышленных взрывчатых веществ был проведен анализ определения идеальной скорости детонации и давления в точке Чепмена – Жуге для трех типов эмульсионных взрывчатых веществ: E682-a, E682-b и E682 с алюминием (табл. 3).

Таблица 3

Состав и детонационные характеристики промышленных взрывчатых веществ E682-a, E682-b и E682 с алюминием

Компонент состава	Название	Массовый состав, %		
		E682-a	E682-b	E682 с алюминием
Раствор	Нитрат аммония	65,31	65,80	61,49
	Нитрат натрия	10,88	10,97	10,25
	Вода	14,52	14,62	13,67
Эмульгатор	Lubrizol 2724	1,50	1,46	1,36
Минеральное масло	Whiterex E309	4,51	4,37	4,09
Стеклянные микросферы	3M K20	3,28	2,79	3,15
Алюминий	A80	–	–	5,99
Детонационные характеристики				
Скорость детонации D , м/с	Эксперимент	5717 ^{(1)*}	5959 ^{(2)*}	5610
	Vixen-I	5664	5929	5586
	Cheetah	5970	6136	6071
	DETO 1.0	5541	5754	5699
Давление в точке Чепмена – Жуге P_{CJ} , ГПа	Эксперимент	–	–	–
	Vixen-I	8,82	10,02	9,28
	Cheetah	8,92	10,00	9,99
	DETO 1.0	8,43	9,39	9,42

* Индекс (1) – при плотности взрывчатого вещества $\rho = 1,126$ г/см³; индекс (2) – $\rho = 1,179$ г/см³.

Полученные результаты сравнивались с экспериментальными данными и результатами расчетов, приведенных в [9], для которых использовалось программное обеспечение Cheetah и Vixen-I.

Согласно данным табл. 3, ошибка в расчетах скорости детонации с использованием различных программ составляет: Vixen-I – 0,6 % (т. е. результаты в наибольшей степени соответствуют экспериментальным данным); Cheetah – 4,9 %; DETO 1.0 – 2,7 %.

Расхождения объясняются тем, что в Vixen-I использовано уравнение состояния JWL, а в Gretetfh и разработанном нами DETO 1.0 – уравнение состояния VKW. Оценку точности результатов расчета для давления на дотационной волне осуществить невозможно, т. к. экспериментальные данные отсутствуют. Однако следует отметить, что разница между результатами расчета с использованием каждой из трех компьютерных программ незначительна.

Заключение

Таким образом, исследования позволили получить следующие результаты:

- на основе математической модели идеальной детонации разработано компьютерное обеспечение DETO 1.0, позволяющее определить детонационные параметры промышленных взрывчатых веществ;
- создана база данных термодинамических свойств для 65 компонентов взрывчатых веществ и 31 продукта детонации, объединенная с программным обеспечением;
- результаты расчета по DETO 1.0 с достаточной степенью точности согласуются с экспериментальными данными и результатами расчета с помощью программного обеспечения Cheetah и Vixen-I;
- алгоритм DETO 1.0 позволяет дополнять и развивать другие компьютерные программы, созданные для моделирования процесса инициирования, детонации и работоспособности промышленных взрывчатых веществ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Комиссаров Ю. А., Дам Куанг Шанг. Многокомпонентная ректификация. М.: Химия, 2013. 272 с.
2. Fried L., Souers P. CHEETAH: A Next Generation Thermochemical Code. Lawrence Livermore National Laboratory, 1994. 27 p.
3. Cunningham C., Braithwaite M., Parker I. Vixen detonation code: Energy input for HSBM // Progr. of the 8th Intern. Symp. on rock fragmentation by blasting (FRAGBLAST 8). 2006. P. 169–174.
4. Dam Quang Sang. Prediction of the Parameters on Detonation-Wave Front of C-H-O-N Explosives // Journal of Science and Technology. 2014. No. 163. P. 80–90 (на вьетнамском языке).
5. White W. B., Johnson S. M., Dantzig G. B. Chemical Equilibrium in Complex Mixtures. The RAND Corporation, California, 1957. 14 p.
6. Mader C. L. Numerical modeling of explosives and propellants. CRC Press, 2008. 528 p.
7. Chase M. W., Davies C. A., Downey J. R., Frurip D. J., McDonald R. A., Syverud A. N. JANAF Thermochemical Tables. J. Phys. Chem. Ref. Data, 1985, vol. 14, suppl. 1, p. 1–1856.
8. Dam Quang Sang. Determination for the Coefficients of Thermodynamic Functions of Some Products Released by Combustion and Detonation Process at Ideal State // Journal of Science and Technology. 2013. No. 152. P. 71–77 (на вьетнамском языке).
9. Hansson H. Determination of properties for emulsion explosives using cylinder expansion tests and numerical simulation. Stockholm: Swebrec Report 2009:1. 2009. 57 p.

Статья поступила в редакцию 21.01.2016,
в окончательном варианте – 20.05.2016

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Комиссаров Юрий Алексеевич – Россия, 125047, Москва; Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, г-р техн. наук, профессор; зав. кафедрой электротехники и электроники; komiss@muctr.ru.

Дам Куанг Шанг – Вьетнам, Ханой; Вьетнамский государственный технический университет им. Ле Куи Дона; канд. техн. наук; преподаватель; damsang2001@yahoo.com.



Yu. A. Komissarov, Dam Quang Shang

COMPUTER SOFTWARE FOR DETERMINATION OF DETONATION AND THERMODYNAMIC PARAMETERS OF INDUSTRIAL EXPLOSIVES

Abstract. The mathematical model of the ideal process of detonation of hard explosives, on the basis of which a computer software DETO 1.0 is worked out. The database of thermodynamic properties of the components of explosives and products of detonation is developed. The software helps predict the detonation parameters (velocity of detonation and pressure at Chepman – Jouget's point) of industrial explosives that presents a particular interest in finding and exploring new explosives. The advantages of the software DETO 1.0 are: simple interface, database as thermodynamic properties of the components of explosives and detonation products, automatic entrance of initial data (thermodynamic properties of 65 components of explosives and 31 detonation products) and easiness of its usage. The results of the calculation of the parameters of explosives using DETO 1.0 and the software Cheetah and Vixen-I with a sufficient degree of accuracy coincide with the parameters of industrial explosives E682-a, E682-b and E682 with aluminium, defined experimentally. The algorithm DETO 1.0 makes it possible to improve and develop the software, designed by other producers for modeling the process of initiating, detonation and operating capacity of industrial explosives.

Key words: industrial explosives, products of detonation, detonation, computer software, database.

REFERENCES

1. Komissarov Yu. A., Dam Quang Shang. *Mnogokomponentnaia rektifikatsiia* [Multivariant rectification]. Moscow, Khimiia Publ., 2013. 272 p.
2. Fried L., Souers P. *CHEETAH: A Next Generation Thermochemical Code*. Lawrence Livermore National Laboratory, 1994. 27 p.
3. Cunningham C., Braithwaite M., Parker I. Vixen detonation code: Energy input for HSBM. *Progr. of the 8th Intern. Symp. on rock fragmentation by blasting (FRAGBLAST 8)*, 2006. P. 169–174.
4. Dam Quang Sang and others. Prediction of the Parameters on Detonation-Wave Front of C-H-O-N Explosives. *Journal of Science and Technology*, 2014, no. 163, pp. 80–90 [in Vietnamese].
5. White W. B., Johnson S. M., Dantzig G. B. *Chemical Equilibrium in Complex Mixtures*. The RAND Corporation, California, 1957. 14 p.
6. Mader C. L. *Numerical modeling of explosives and propellants*. CRC Press, 2008. 528 p.
7. Chase M. W., Davies C. A., Downey J. R., Frurip D. J., McDonald R. A., Syverud A. N. JANAF Thermochemical Tables. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1985, vol. 14, suppl. 1, p. 1–1856 p.
8. Dam Quang Sang. Determination for the Coefficients of Thermodynamic Functions of Some Products Released by Combustion and Detonation Process at Ideal State. *Journal of Science and Technology*, 2013, no. 152, pp. 71–77 [in Vietnamese].
9. Hansson H. *Determination of properties for emulsion explosives using cylinder expansion tests and numerical simulation*. Stockholm: Swebrec Report 2009:1. 2009. 57 p.

The article submitted to the editors 21.01.2016,
in the final version – 20.05.2016

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Komissarov Yuriy Alekseevich – Russia, 125047, Moscow; Mendeleev Russian Chemical and Technological University; Doctor of Technical Sciences, Professor; Head of the Department of Electrical Engineering and Electronics; komiss@muctr.ru.

Dam Quang Shang – Vietnam, Hanai; Vietnam State Technical University named after Le Khuy Dona; Candidate of Technical Sciences; Lecturer; damsang2001@yahoo.com.

