

УДК 662.215.4

ТРЕХМЕРНОЕ МЕХАНОТЕРМОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЛАПСА ВОЗДУШНОГО ПУЗЫРЯ В КРИСТАЛЛЕ ОКТОГЕНА

G. Wang¹, Y. Wang¹, Y. Lin², Q. Wen¹, W. Zeng³¹Нанкинский научно-технологический университет, 210094 Нанкин, Китай, gwang@njust.edu.cn²Университет Цинциннати, 45221 Цинциннати, Огайо, США³Университет Вирджинии, 22911 Шарлотсвилль, Вирджиния, США

Октоген широко используется в современном оружии в качестве основного компонента пластических взрывчатых веществ. Известно, что безопасность этих веществ тесно связана с их микроструктурой. Нарушения однородности, такие как поры микронного размера, пузырьки воздуха, границы раздела между кристаллами и связующим, могут трансформироваться в горячие точки при ударном воздействии. Предложена трехмерная механотермохимическая связанная модель для исследования коллапса воздушного пузыря в кристалле октогена при ударе. Для прогнозирования механического отклика октогена на ударную нагрузку использованы вязкопластическая модель и уравнение состояния Берча — Мурнагана. Термическое разложение октогена моделировалось с помощью многоступенчатых уравнений термического разложения. Вязкопластическая модель дает результаты, приемлемо согласующиеся с экспериментом при плоском ударе. Проведен анализ влияния длины ребра расчетного элемента на результаты моделирования. Выполнен ряд численных расчетов для изучения обоснованности применения вязкопластической модели при различных ориентациях решетки октогена. Впоследствии разработанная модель использовалась для изучения коллапса воздушного пузырька/поры в кристалле октогена при различных скоростях удара.

Ключевые слова: октоген, вязкопластическая модель, термическое разложение, уравнения Аррениуса, воздушный пузырь.

DOI 10.15372/FGV20210111

ВВЕДЕНИЕ

Октоген (HMX) является основным компонентом пластических взрывчатых веществ (PBX 9501, PBX 9404 и т. д.), которые широко применяются в современных системах вооружения. Известно, что безопасность пластических взрывчатых веществ (ВВ) тесно связана с их микроструктурой, которая определяется типом ВВ и полимера, массовой долей ВВ, морфологией кристаллов ВВ и порами/пузырьками воздуха микронных размеров, существующими в пластических ВВ. Места разрывов плотности (поры/пузырьки воздуха, границы раздела между кристаллами ВВ и полимерами, трещины и т. д.) при ударе могут сильно нагреваться

и превращаться в горячие точки. Хорошо известно, что наличие пузырьков газа или твердых частиц в неоднородном ВВ может снизить давление, необходимое для инициирования ВВ, от ≈ 10 ГПа до нескольких сотен мегапаскалей [1]. Поэтому случайный взрыв обычно является второй по величине категорией, которая вызывает наибольшую гибель людей и нежелательный ущерб, исключая использование ВВ во время войны [2].

Авторы [1] провели «идеальный» эксперимент в лаборатории для изучения влияния сжатого пузырька воздуха (расположенного вне кристалла ВВ) на инициирование кристаллов типичных ВВ, таких как тэн и азид серебра. Согласно их расчетам температура сжатого пузырька воздуха при адиабатическом сжатии может быть больше 1500 К. Проведено также изучение влияния различных размеров и составляющих пузырьков на инициирование кристаллов ВВ. В работах [3–6] исследовался коллапс пузырьков воздуха микронного размера внутри ХТХ-8003 (пластическое ВВ на

© Wang G.¹, Wang Y.¹, Lin Y.², Wen Q.¹, Zeng W.³, 2021.

¹School of Mechanical Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing, 210094, China.

²College of Engineering and Applied Science, University of Cincinnati, Cincinnati, 45221, USA. ³Center for Applied Biomechanics, University of Virginia, Charlottesville, 22911 USA.

основе тэна) при ударе, наблюдалась необычайно высокая температура до 6500 К, намного выше, чем у продуктов взрыва, которая обычно находится в диапазоне 2000 ÷ 4000 К. Авторы [7, 8] экспериментально исследовали характеристики горячих точек, возникающих в результате ударного разрушения стеклянных/полимерных микробаллонов в конденсированной среде, и проанализировали возможные механизмы, которые обеспечивают довольно хорошее понимание генерации горячих точек, вызванных ударом в ВВ.

В работе [9] предложен механизм взрыва мощных конденсированных ВВ при низкоскоростном механическом воздействии, связанном с работой вязких сил в жидкой фазе ВВ. Хотя экспериментальное исследование коллапса воздушного пузырька в кристаллах ВВ и в пластических ВВ ведется давно, численное моделирование процесса началось значительно позже из-за его сложной природы. Авторы [10, 11] предложили аналитические модели процесса сжатия поры в смеси октоген/ТАТБ для моделирования образования горячей точки.

В работе [12] предложена модификация аналитической модели [10] путем включения воздуха в моделирование ударного воспламенения октогена. Однако аналитическая модель часто не способна решать сложные проблемы из-за своих «идеальных» допущений и объектов исследования. Авторы [13–16] провели численное исследование инициирования горячей точки в ТАТБ или октогене с использованием собственного программного обеспечения ALE3D. В работе [16] изучали различные механизмы образования горячих точек, вызванных ударами разной скорости, а также влияние формы пор на формирование горячих точек.

В [17–19] рассмотрено несколько математических моделей, необходимых для разработки мезоскопической модели октогена, включая вязкопластические конститутивные модели, уравнения состояния и т. д. Численное моделирование схлопывания пор в октогене в рамках представлений Эйлера реализовано в [20, 21]. В разработанной в [21] трехмерной модели использовались многоступенчатые уравнения термического разложения октогена [22]. Однако в рамках уравнений Эйлера границы между материалами размыты и, кроме того, сложно отследить траекторию конкретной материальной точки. Эти проблемы могут быть разрешены при использовании лагранжева подхода,

такими методами, как метод конечных элементов, метод гидродинамики сглаженных частиц (SPH) и метод сглаженных частиц Галеркина.

В данной работе построена и применена трехмерная механотермохимическая сопряженная модель для моделирования схлопывания воздушного пузырька внутри кристалла октогена с использованием подпрограмм ANSYS/LS-DYNA. Проведен количественный анализ влияния пузырька воздуха на инициирование октогена при различных скоростях удара.

1. ОСНОВНЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, НЕОБХОДИМЫЕ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ МЕХАНОТЕРМОХИМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Основные уравнения явного метода конечных элементов в программе ANSYS/LS-DYNA можно описать следующим образом [23]:

$$\rho V = \rho_0, \quad (1)$$

$$\sigma_{ij,j} + \rho f_i = \rho \ddot{x}_i, \quad (2)$$

$$\dot{E} = V \sigma'_{ij} \dot{\epsilon}_{ij} - (p + \kappa) \dot{V} + \dot{q} \rho V. \quad (3)$$

Здесь ρ — плотность, V — относительный объем, ρ_0 — исходная плотность материала, σ_{ij} — тензор полных напряжений, f_i — плотность массовых сил, \ddot{x}_i — ускорение, E — абсолютная внутренняя энергия, σ'_{ij} — тензор девиаторных напряжений, $\dot{\epsilon}_{ij}$ — тензор скоростей деформации, p — гидростатическое напряжение, κ — объемная вязкость, \dot{q} — скорость тепловыделения.

Тензор полных напряжений σ_{ij} можно разделить на две составляющие — девиаторное и гидростатическое напряжение:

$$\sigma_{ij} = \sigma'_{ij} - p \mathbf{I}, \quad (4)$$

где \mathbf{I} — единичная матрица. Тензор девиаторных напряжений σ'_{ij} может быть рассчитан на основе модели материала, а гидростатическое напряжение p можно получить с помощью уравнения состояния (УРС) материала.

1.1. Вязкопластическая модель октогена

Октоген является анизотропным материалом [17], поэтому, если учитывать анизотропность, вязкопластическая конститутивная модель становится более сложной. В данной работе для упрощения октоген считается изотропным материалом.

На основании экспериментальных результатов [24–27] установлено, что поведение октогена при ударном нагружении можно приближенно описать с использованием вязкопластической модели. В настоящей работе применяется модель [17]:

$$\frac{d\sigma'_{ij}}{dt} = 2G \frac{d\varepsilon'_{ij}}{dt} - \frac{G}{\eta} \left(1 - \frac{\sqrt{2/3}\sigma_y}{\|\sigma'_{ij}\|} \right)_+ \quad (5)$$

Здесь ε'_{ij} — девиаторная деформация, G — модуль сдвига, η — параметр с размерностью вязкости, σ_y — предел текучести по Мизесу, $\|\sigma'_{ij}\|$ — напряжение по Мизесу, f_+ — положительная часть переменной f :

$$f_+ = \max(f, 0). \quad (6)$$

Всякий раз, когда рассчитанное напряжение превышает предел текучести, оно вновь рассчитывается в соответствии с критерием Мизеса:

$$\sigma'_{ij} = a_{scale} \sigma'_{ij}, \quad (7)$$

$$a_{scale} = \sigma_y / \max(\sigma_y, \|\sigma'_{ij}\|). \quad (8)$$

Параметры для октогена в уравнении (5) взяты из работы [17]: $G = 12$ ГПа, $\eta = 110$ Па·с, $\sigma_y = 260$ МПа.

1.2. УРС Берча — Мурнагана для октогена

Гидростатическое давление материалов часто можно выразить как функцию плотности и температуры (внутренней энергии), которая известна как уравнение состояния. УРС часто используются для расчета гидростатического давления материалов при ударе. Авторы [28] провели ряд экспериментов для получения УРС октогена при изотермических условиях. Затем они аппроксимировали экспериментальные данные, используя УРС Берча — Мурнагана, следующим образом:

$$p(V) = \frac{3}{2} K_{T0} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{7/3} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{5/3} \right] \times \left\{ 1 + \frac{3}{4} (K'_{T0} - 4) \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right] \right\}, \quad (9)$$

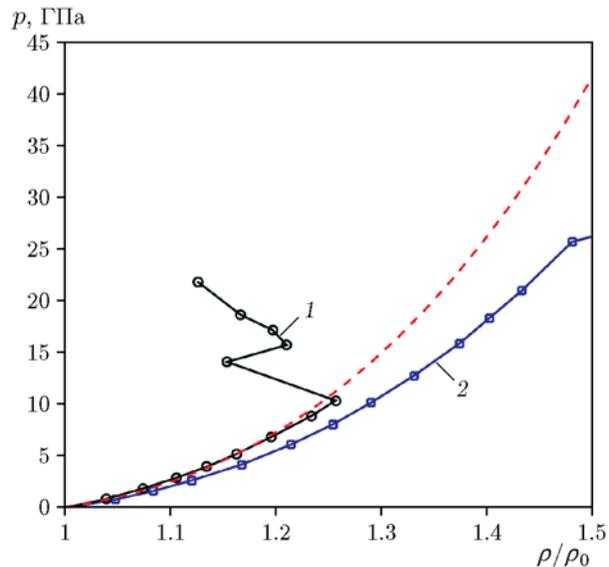


Рис. 1. Сравнение результатов расчета по УРС Берча — Мурнагана для октогена (штриховая линия) с данными экспериментов при негидростатических (1) и гидростатических условиях (2)

где V_0 ($V_0 = 1/\rho_0$) — исходный удельный объем, V ($V = 1/\rho$) — текущий удельный объем, K_{T0} и K'_{T0} — соответственно модуль объемного сжатия и его производная по давлению. Параметры УРС Берча — Мурнагана для октогена подобраны на основе негидростатического эксперимента [28] и составляют $\rho_0 = 1860$ кг/м³, $K_{T0} = 14.4$ ГПа, $K'_{T0} = 13.3$.

На рис. 1 представлены результаты расчетов по этому уравнению и данные негидростатических и гидростатических экспериментов. Видно, что при $p \approx 10$ ГПа давление в негидростатическом эксперименте изменяется зигзагообразно, что указывает на химическую реакцию в октогене. При $\rho/\rho_0 \lesssim 1.26$ расчет по уравнению Берча — Мурнагана хорошо согласуется с негидростатическим экспериментом. Необходимо отметить, что УРС Берча — Мурнагана получено в изотермических условиях и требуется его преобразование в изоэнтропическое УРС.

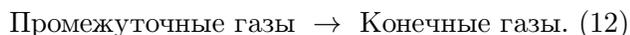
1.3. Модель термического разложения октогена при ударе с умеренной скоростью

При ударе с умеренной скоростью октоген может испытывать большую пластическую деформацию и даже фрагментацию. Тепло, генерируемое при пластической деформации, мо-

жет повысить температуру локальных областей октогена до сотен или даже тысяч градусов, что приводит к плавлению или дальнейшему термическому разложению октогена. Следовательно, при разработке механотермохимической модели октогена при ударе с умеренной скоростью необходимо учитывать его термическое разложение.

Известно, что скорость реакции термического разложения энергетических материалов тесно связана с температурой, давлением и рядом других факторов [29, 30]. Авторы [31–34] предложили несколько многоступенчатых моделей термического разложения, зависящих от температуры, чтобы моделировать термическое разложение энергетических материалов. По этим моделям можно с достаточной точностью рассчитывать время между началом воспламенения и возможным тепловым взрывом этих материалов.

В настоящей работе модель термического разложения, предложенная в [22], использовалась для расчета эндотермического и экзотермического эффекта октогена при ударе. Модель состоит из трех последовательных химических реакций [22]:



Каждая из них описывается с использованием уравнения Аррениуса в виде

$$\frac{dq}{dt} = (N_a)^x Z \exp\left(-\frac{E}{RT}\right), \quad (13)$$

где $\frac{dq}{dt}$ — скорость тепловыделения, N_a — массовая доля реагента на единицу объема, x — порядок реакции, Z — предэкспонент, E — энергия активации, $R = 8.314$, T — температура.

Температурно-зависимые термические свойства октогена приведены в табл. 1 [22], а параметры уравнений термического разложения октогена — в табл. 2 [22].

1.4. Уравнение состояния воздуха

Воздушный пузырь внутри кристалла ВВ сильно сжимается при ударном нагружении, и его температура может достигнуть 6 500 К или

Таблица 1
Тепловые свойства октогена плотностью 1860 кг/м³

T , К	c_v , Дж/(кг·К)	Теплопроводность, Вт/(м·К)
293	1 004.2	0.5146
433	1 422.6	0.4059
533	1 673.6	0.3389
623	1 924.6	0.2929 (>623 К)
773	2 301.2	—
>1 273	2 301.2	—

Таблица 2
Параметры модели термического разложения октогена при ударе

Номер реакции	Z	E , 10 ⁵ Дж/моль	Порядок реакции	Q , 10 ⁵ Дж/кг
1	$1.4130 \cdot 10^{21}$	2.2050	1	-4.184 ^a
2	$1.5819 \cdot 10^{16}$	1.8451	1	12.552
3	$1.5984 \cdot 10^{12}$	1.4267	2	50.208

^aЗнак минус в значении теплоты реакции Q соответствует эндотермическому эффекту, плюс — экзотермическому.

даже больше, как это наблюдалось в эксперименте [3–6]. Для моделирования воздуха был использован бессеточный метод Лагранжа SPH [23], часто применяемый для решения гидродинамических задач, а также при моделировании задач высокоскоростного удара и взрыва. В текущей модели коллапс воздушного пузыря считался адиабатическим процессом, потому что весь процесс занимает всего ≈ 0.05 мкс. Вязкость воздуха не учитывалась.

Давление воздуха под ударом рассчитывалось с использованием следующего УРС:

$$p = (\gamma - 1) \frac{E}{v_r}, \quad (14)$$

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v}, \quad (15)$$

$$v_r = \frac{\rho_0}{\rho}, \quad (16)$$

где $\gamma = 1.403$ — отношение удельной теплоемкости при постоянном давлении c_p к удельной

Таблица 3
Тепловые свойства воздуха плотностью 1.29 кг/м³

T , К	c_v , Дж/(кг·К)	Теплопроводность, Вт/(м·К)
293.15	717.70	0.0259
460.96	736.23	0.0375
628.77	770.89	0.0476
796.58	810.88	0.0570
964.38	845.97	0.0659
1 132.19	875.74	0.0742
1 300.00	897.30	0.0824

теплоемкости при постоянном объеме c_v , E — энергия на единицу контрольного объема.

Тепловые свойства воздуха приведены в табл. 3.

2. ВАЛИДАЦИЯ МОДЕЛИ ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ С ПЛОСКИМ УДАРОМ

Схема типичного эксперимента при плоском ударном нагружении пластиной из алюминия 2024 [25] показана на рис. 2. Кристалл октогена закреплен на покрытом алюминием кварцевом диске диаметром 50.8 мм. Окно из полиметилметакрилата (ПММА) диаметром и толщиной 12.7 мм прикреплено к тыльной части образца октогена с помощью эластомера. Боковые стороны кристалла октогена и окна из ПММА окружены смесью эпоксидной смолы и 40 % (об.) кварца, чтобы минимизировать краевой эффект. Профиль массовой скорости границы раздела образец — ПММА регистрируется интерферометром VISAR в точке 1 на рис. 2.

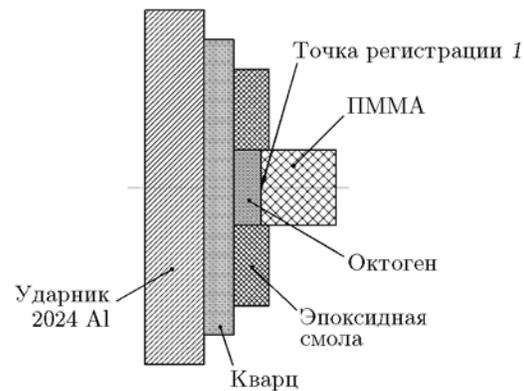


Рис. 2. Схема ударного эксперимента

2.1. Проверка вязкопластической модели октогена и анализ разрешения

Для моделирования эксперимента 1168 [25] была использована четверть модели конечных элементов. Модель включала в себя алюминиевый ударник, кварцевый диск, образец октогена, эпоксидную смолу и окно из ПММА. Ударник из алюминия считался «жестким», его скорость равнялась 313.2 м/с. Толщина образца октогена 4.66 мм. Ориентация решетки октогена, которая подвергалась нагружению, — (011). Для создания сетки конечно-элементной модели использовался шестигранник со средней длиной ребра $l = 0.25$ мм.

Для моделирования реакции октогена при ударе использованы упомянутые ранее вязкопластическая модель и УРС Берча — Мурнагана, а для кварца, эпоксидной смолы и ПММА — идеально упругопластические модели и УРС Ми — Грюнайзена, как указано в табл. 4.

Контуры давления в эксперименте с плоским ударом в различные моменты показаны на рис. 3. Вначале в кварце в результате удара алюминиевого диска возникает приближи-

Таблица 4
Параметры идеально упругопластической модели и УРС для кварца, эпоксидной смолы и ПММА

Материал	ρ , кг/м ³	Идеально упругопластическая модель		УРС Ми — Грюнайзена		
		G , ГПа	σ_y , МПа	c , м/с	s	γ
Кварц	2 650	44.00	48.0	794.0	1.695	0.9
Эпоксидная смола	1 186	1.26	69.0	2 730.0	1.493	1.13
ПММА	1 182	2.32	420.0	2 766.5	1.41	0.85

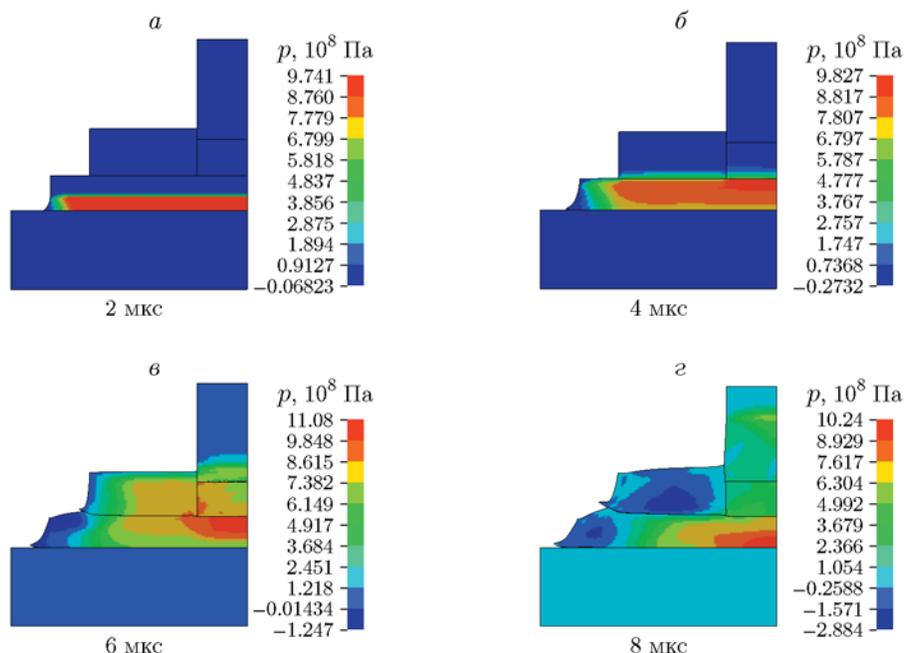


Рис. 3. Контуры давления в различные моменты времени при моделировании эксперимента со скоростью ударника 313.2 м/с

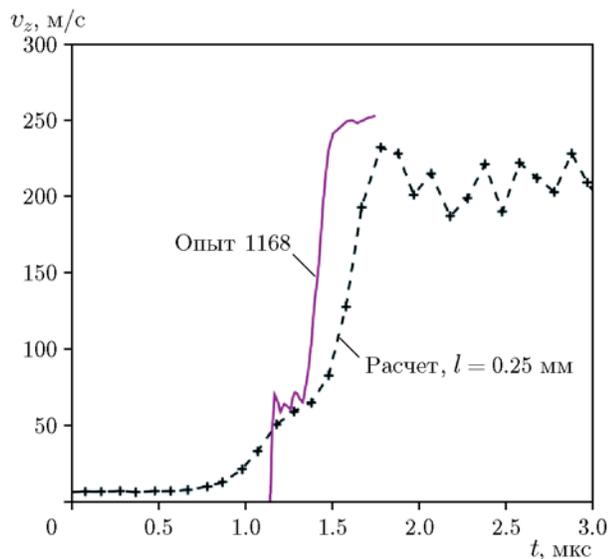


Рис. 4. Сравнение расчетного профиля массовой скорости (в точке 1 на рис. 2) с экспериментом 1168 при ударе со скоростью 313.2 м/с

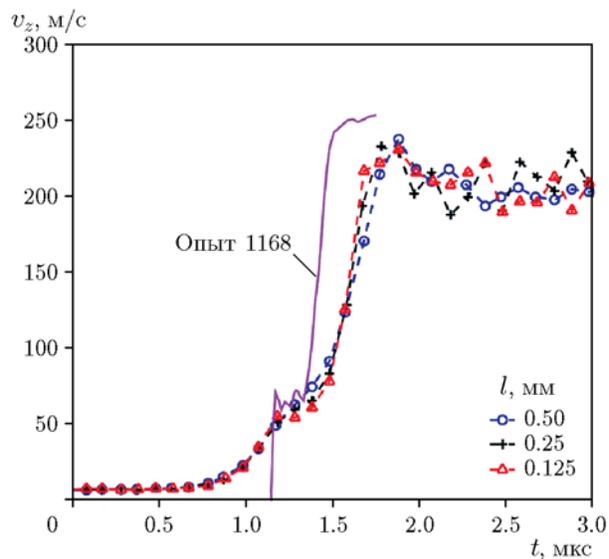


Рис. 5. Влияние длины ребра элементов на профили массовой скорости при ударе со скоростью 313.2 м/с

тельно плоский ударный скачок. Затем ударная волна проходит в образец октогена и окно из ПММА. На рис. 4 сопоставлены экспериментальный [25] и расчетный профили массовой скорости u в точке 1 (см. рис. 2). Отметим, что используемая модель воспроизводила вязкопластический отклик октогена при ориента-

ции (011).

На рис. 5 показаны результаты анализа разрешающей способности для исследования влияния размера l элемента сетки на сходимость результатов моделирования. По мере уменьшения среднего размера элемента характеристика вязкопластического отклика октоге-

на становится более четкой. Однако расчетные профили массовой скорости оказываются более размытыми по сравнению с экспериментом, даже когда использовалась сетка со средней длиной ребра шестигранника $l = 0.125$ мм. Это показывает, что для получения сходимого результата при моделировании требуется более мелкая сетка. Из-за ограниченности вычислительных ресурсов использование более мелкой сетки для текущей модели было невозможно. Дальнейший анализ разрешения для микроскопической модели проведен в § 3.1 с целью определить необходимую длину ребра расчетного элемента для сходимости результатов моделирования.

2.2. Реализуемость вязкопластической модели при других ориентациях решетки октогена

Известно, что октоген — анизотропный материал. Отклик октогена с разной ориентацией решетки при воздействии удара различается, что подтверждено экспериментами [27]. Чтобы исследовать обоснованность применения используемой модели при ориентациях решетки октогена (110) и (010), был проведен ряд вариантов моделирования и результаты сопоставлены с экспериментами [27]. Использовались те же изотропная модель, УРС и схема экспериментов, которые описаны в § 2.1, за исключением толщины образцов октогена и скорости ударника, которые приведены в табл. 5.

Расчетные профили массовой скорости сопоставлены с экспериментальными для трех ориентаций решетки октогена на рис. 6. Можно заметить, что для ориентаций (110) и (010) расчетные профили явно не соответствуют экспериментальным. Следовательно, изотропная модель и УРС более применимы для моделирования вязкопластического поведения при ориентации кристалла октогена (011).

Таблица 5

Условия экспериментов, используемые в различных случаях моделирования

Номер опыта	Ориентация решетки	Толщина кристаллов октогена, мм	Скорость ударника, м/с
1168	(011)	4.66	313.2
1067	(110)	3.21	317.0
1241	(010)	3.49	308.9

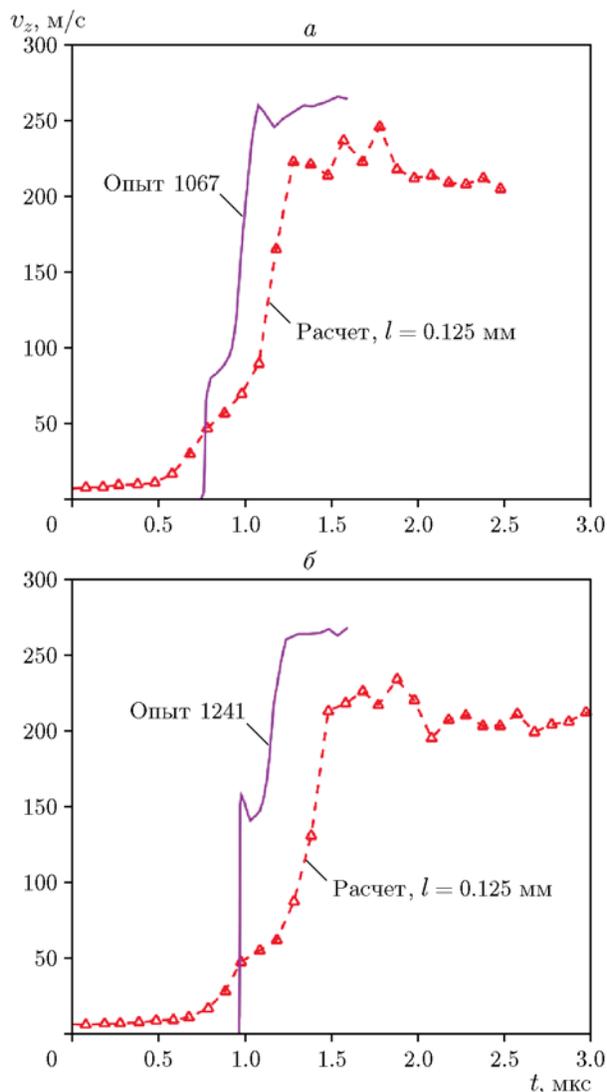


Рис. 6. Сравнение рассчитанных профилей массовой скорости с экспериментальными при ориентациях решетки октогена (110) (а, опыт 1067) и (010) (б, опыт 1241)

3. МЕХАНОТЕРМОХИМИЧЕСКАЯ СОПРЯЖЕННАЯ МОДЕЛЬ КРИСТАЛЛА ОКТОГЕНА С ВОЗДУШНЫМ ПУЗЫРЕМ ВНУТРИ

3.1. Анализ разрешения для микроскопической модели

Для анализа разрешения использовался кубический образец октогена с длиной ребра 100 мкм. Для четырех боковых граней куба заданы нормальные граничные условия с фиксированным смещением. Для создания сетки куба использовались шестигранные (кубиче-

ские) элементы с длиной ребра 50, 25, 12.5, 6.25 и 3.13 мкм. Основная модель, УРС и модель термического разложения были такими же, как и ранее. Для моделирования ударно-волнового нагружения нижним узлом куба задавалась вертикальная скорость 500 м/с.

Изменение вертикальной скорости (u_y) и температуры узла, который расположен в центре боковой грани куба, иллюстрирует рис. 7. Видно, что по мере уменьшения длины ребра кубических элементов рассчитанные про-

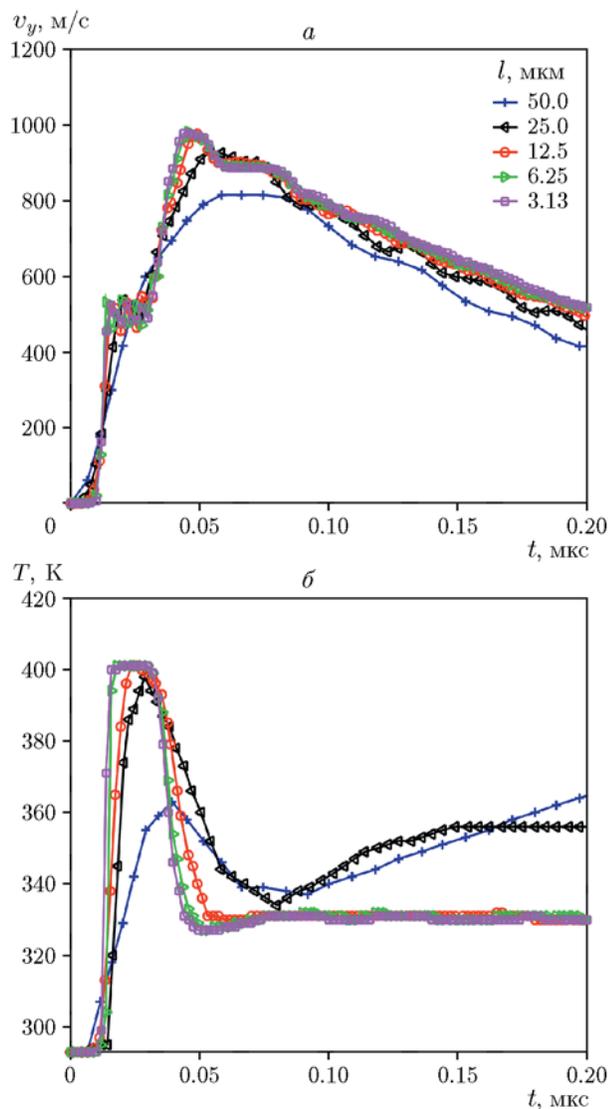


Рис. 7. Профили вертикальной скорости (а) и температуры узла образца (б), расположенного в центре боковой грани кубического октогена, при ударе со скоростью 500 м/с и при различной длине ребра элементов расчетной сетки

фили вертикальной скорости и температуры в точке регистрации постепенно сходятся. По-видимому, для сходимости расчетных результатов необходима длина ребра ≈ 6.25 мкм.

3.2. Коллапс воздушного пузыря внутри кристалла октогена

На рис. 8 показана модель кристалла октогена со сферическим воздушным пузырем диаметром 100 мкм, расположенным в центре кристалла. Жесткая пластина ударяла по кристаллу снизу с постоянной скоростью $v_{imp} = 500$ м/с по оси y . Моделирование коллапса пузыря проводилось методом SPH. Частицы SPH имели регулярное начальное распределение. Общее количество частиц составило 33 552. В качестве элементов расчетной сетки в кристалле использовались тетраэдры со средней длиной ребра $l \approx 5$ мкм.

Распределение температуры в кристалле октогена в разные моменты показано на рис. 9. Видно, что, как только пришла пластическая волна, пѳра сразу схлопнулась снизу, в то время как высокоскоростная струя октогена (с максимальной скоростью 3 251.9 м/с) образовалась снизу и ударила по верху поры.

Профили y -компоненты скорости и температуры в точках регистрации в нижней (2) и верхней (1) частях поры (как показано на рис. 8) представлены на рис. 10. На рис. 10,а видно, что максимальная y -компонента скорости в точке 1 намного выше, чем у жесткого ударника. Инициирование в верхней части поры произошло в результате сильного удара высокоскоростной струи октогена. Изменение формы и давления воздушного пузыря во времени представлено на рис. 11, где показана поверхность воздушного пузыря (частицы SPH).

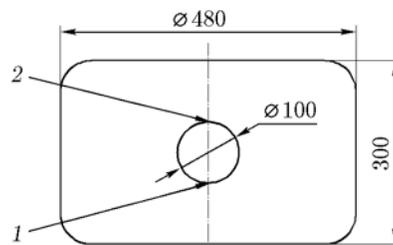


Рис. 8. Схема сечения кристалла октогена с воздушным пузырем внутри:
1, 2 — точки наблюдения, размеры указаны в микрометрах

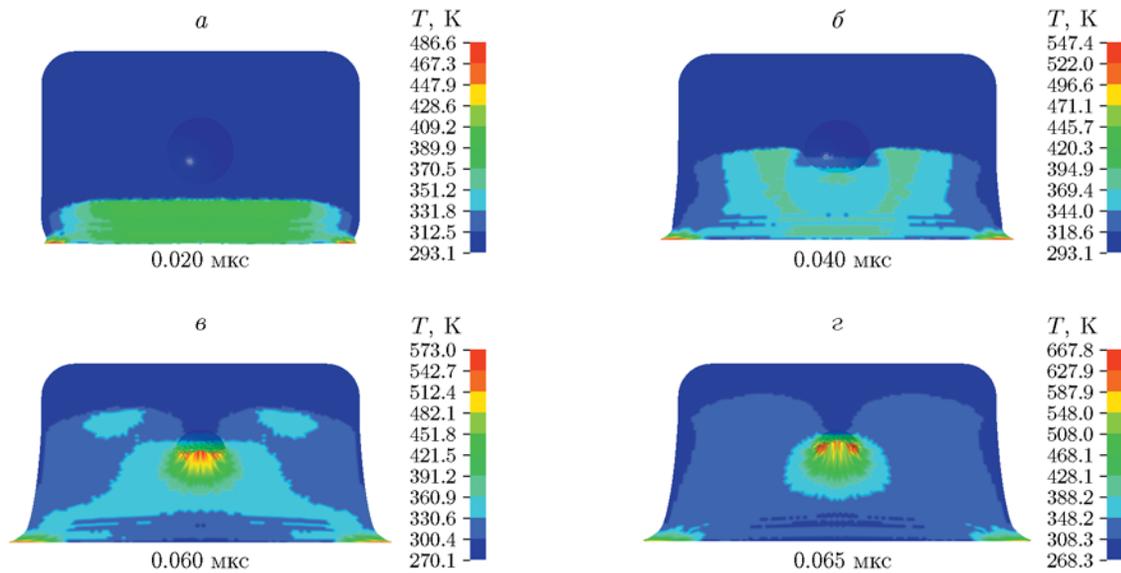


Рис. 9. Распределение температуры в кристалле октогена в разные моменты при ударе со скоростью 500 м/с (сечение кристалла по центру перпендикулярно оси z)

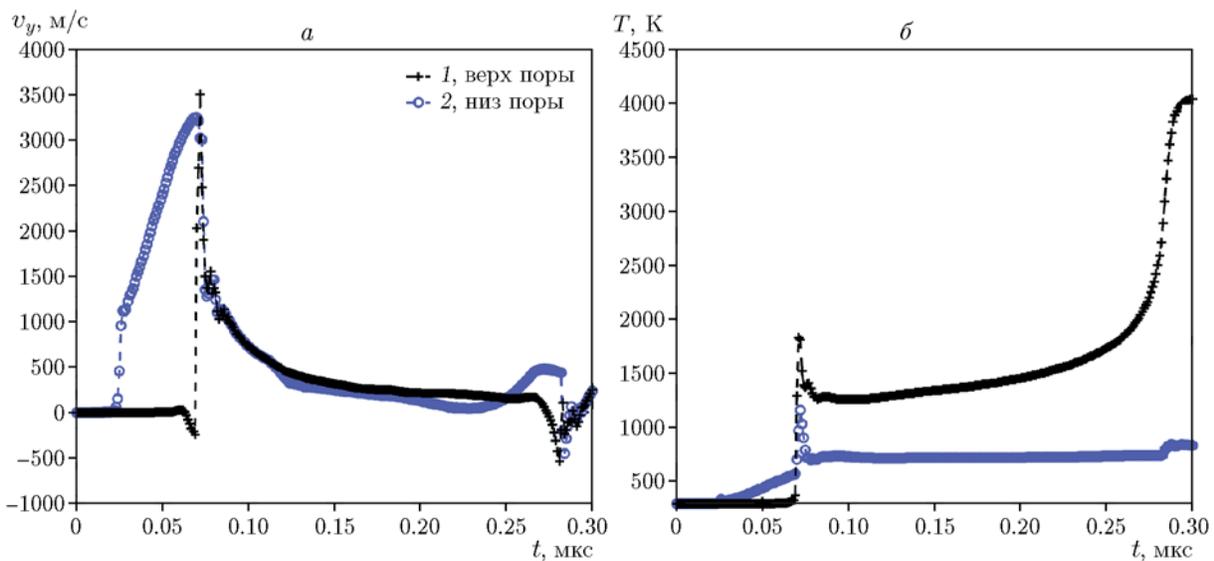


Рис. 10. Профили y -компоненты массовой скорости (а) и температуры в нижней и верхней частях поры (б) при ударе со скоростью 500 м/с

3.3. Влияние пузыря воздуха при различных скоростях удара

В рамках той же модели (с воздушным пузырем внутри) проведена серия модельных расчетов при скоростях удара $v_{imp} = 100 \div 500$ м/с. Обнаруженная тенденция заключается в том, что чем выше скорость удара, тем больше наклон y -компоненты скорости у дна поры (точка 1) на кривых рис. 12, а и выше пик y -компоненты в верхней части поры (точ-

ка 2), как видно на рис. 12, б.

Чтобы исследовать влияние пузыря воздуха на результаты моделирования при различных скоростях удара, была проведена еще одна серия расчетов без воздуха внутри поры (но при существовании поры). Сравнение рассчитанных максимумов температуры кристалла октогена с воздухом в пузыре и без него показано на рис. 13. Видно, что при скорости $v_{imp} < 200$ м/с влияние воздушного пузыря не очевидно. Однако при $v_{imp} > 200$ м/с вли-

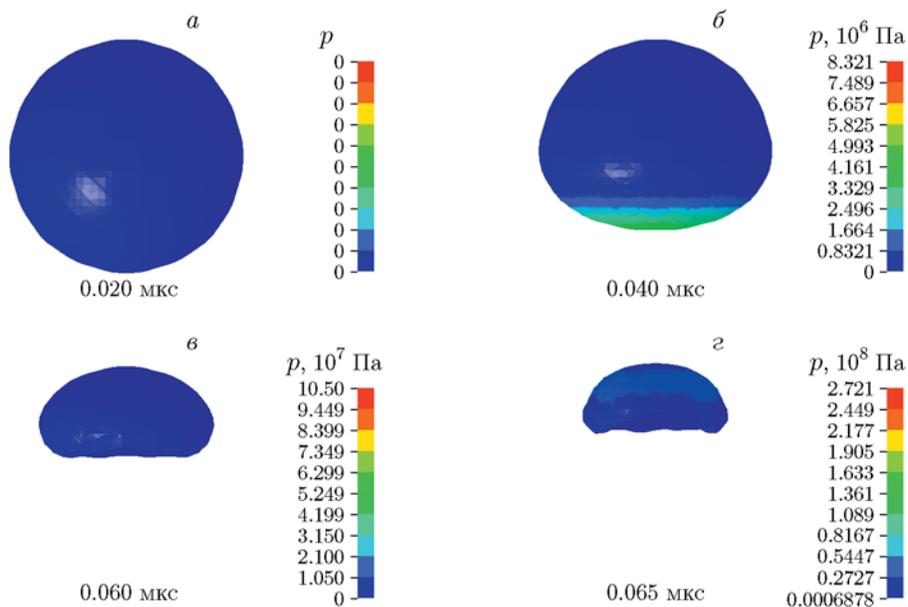


Рис. 11. Изменение формы и давления воздушного пузыря во времени при ударе со скоростью 500 м/с (сечение в центре перпендикулярно оси z)

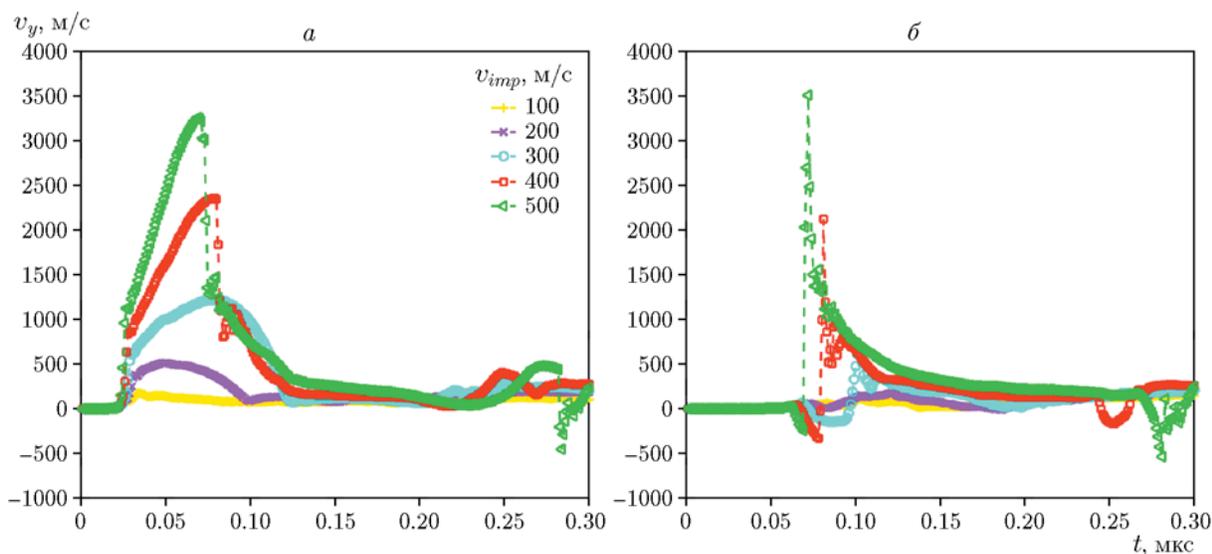


Рис. 12. Зависимость y -компоненты массовой скорости у нижней (a) и верхней ($б$) частей поры от скорости ударника

яние пузыря воздуха внутри кристалла октогена становится существенным. В частности, при $v_{imp} = 500$ м/с кристалл октогена с воздушным пузырем внутри инициируется в пределах 0.3 мкс, а в противном случае — нет. Возможно, что при более высокой скорости удара высокие давление и температура воздуха в поро влияют на распределение давления вокруг внутренней поверхности поро, что может способствовать воспламенению октогена.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена трехмерная механотермомеханическая сопряженная модель для моделирования схлопывания воздушного пузыря внутри кристалла октогена. Для прогнозирования механической реакции кристалла октогена при ударно-волновом нагружении использованы вязкопластическая конститутивная модель и уравнение состояния Берча — Мурнагана. Термическое разложение октогена учиты-

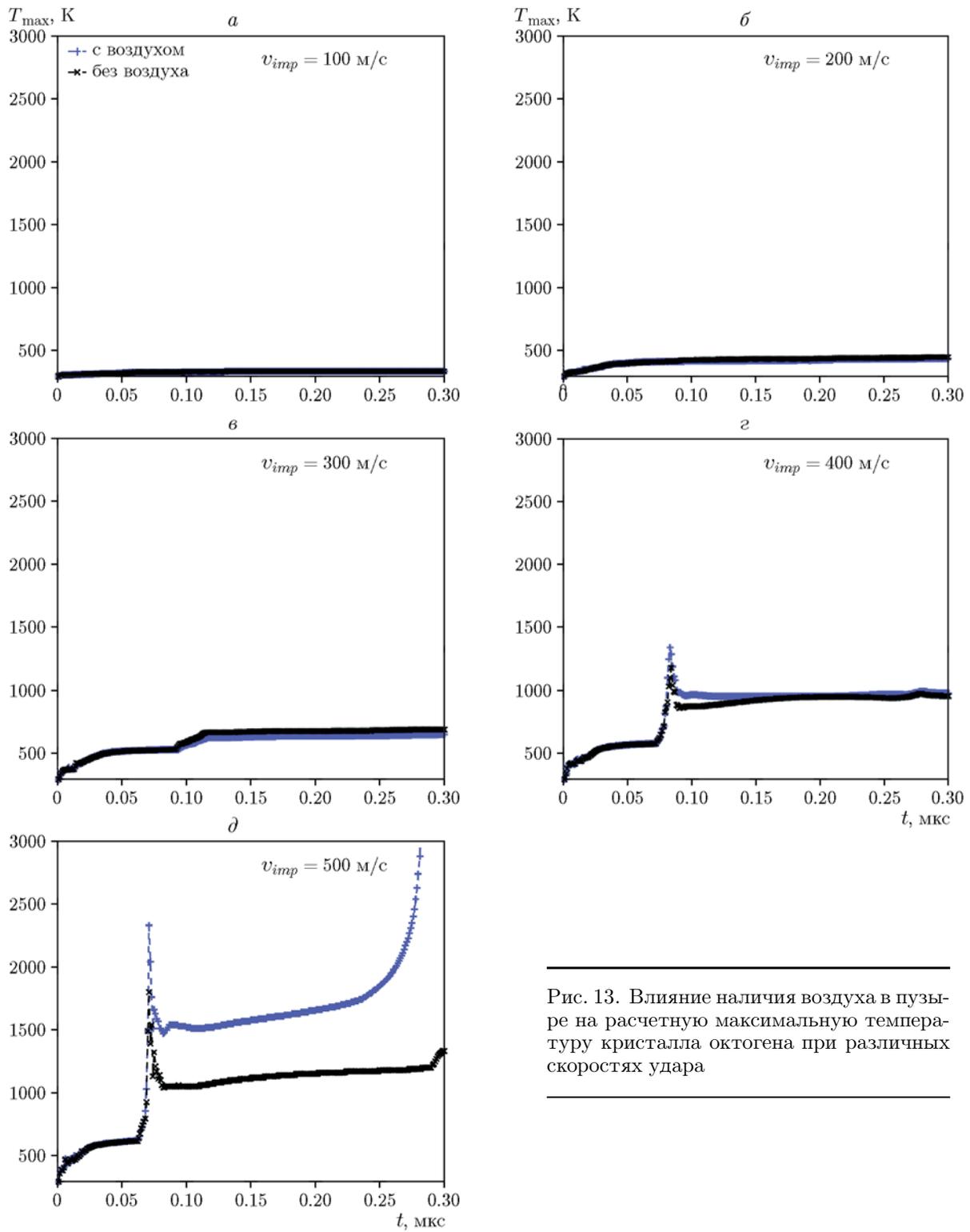


Рис. 13. Влияние наличия воздуха в пузыре на расчетную максимальную температуру кристалла октогена при различных скоростях удара

валось с помощью многоступенчатых уравнений термического разложения. Валидация вязкопластической модели подтверждена путем сравнения с экспериментом с плоским ударом, и обнаружено хорошее согласие. Проведен анализ разрешения и установлено, что при размере элемента менее 0.1 мм модель может уловить вязкопластические свойства октогена при его реакции на ударную нагрузку. Однако расчетные профили массовой скорости оказались размытыми, это свидетельствует о том, что для сходимости результатов моделирования необходима более мелкая сетка.

Разработанная вязкопластическая модель использована при различных ориентациях решетки октогена. Она имеет относительно хорошую точность для ориентации (011), но низкую точность для ориентаций (110) и (010). Проведен дополнительный анализ разрешения для микроскопического кубического образца октогена при скорости ударной волны 500 м/с. Установлено, что для сходимости результатов моделирования кубические элементы должны иметь длину ребра около 6.25 мкм.

Механотермохимически сопряженная модель использована для моделирования схлопывания воздушного пузыря внутри кристалла октогена. Влияние пузыря воздуха на инициирование кристалла октогена проанализировано количественно. При скорости удара менее 200 м/с влияние воздушного пузыря не очевидно, однако при больших скоростях удара влияние становится значительным. По-видимому, при больших скоростях удара высокие давление и температура воздуха в поре влияют на распределение давления вокруг внутренней поверхности поры.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Chaudhri M. M., Field J. E.** The role of rapidly compressed gas pockets in the initiation of condensed explosives // *Proc. Roy. Soc. London A.* — 1974. — P. 113–128. — DOI: <https://doi.org/10.1098/rspa.1974.0143>.
2. **Field J. E.** Hot spot ignition mechanisms for explosives // *Accounts of Chem. Res.* — 1992. — V. 25, N 11. — P. 489–496. — DOI: <https://doi.org/10.1021/ar00023a002>.
3. **Bassett W. P., Dana D. D.** Shock initiation of explosives: Temperature spikes and growth spurts // *Appl. Phys. Lett.* — 2016. — V. 109. — P. 091903. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4961619>.
4. **Bassett W. P., Dana D. D.** Multichannel emission spectrometer for high dynamic range optical pyrometry of shock-driven materials // *Appl. Phys. Lett.* — 2016. — V. 87. — P. 103107. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4964386>.
5. **Bassett W. P., Dana D. D.** High dynamic range emission measurements of shocked energetic materials: Octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine (HMX) // *Appl. Phys. Lett.* — 2016. — V. 119. — P. 225103. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4953353>.
6. **Bassett W. P., Johnson B. P., Neelakantan N. K., Suslick K. S., Dlott D. D.** Shock initiation of explosives: high temperature hot spots explained // *Appl. Phys. Lett.* — 2017. — V. 111, N 6. — P. 061902. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4985593>.
7. **Караханов С. М., Пластинин А. В., Бордзиловский Д. С., Бордзиловский С. А.** Время формирования горячих точек при ударном сжатии микробаллонов в конденсированной среде // *Физика горения и взрыва.* — 2016. — Т. 52, № 3. — С. 105–113.
8. **Бордзиловский С. А., Караханов С. М., Сильвестров В. В.** Оптическое излучение ударно-сжатой эпоксидной смолы со стеклянными микросферами // *Физика горения и взрыва.* — 2014. — Т. 50, № 3. — С. 105–112.
9. **Нефедов В. С.** Иницирование взрывчатых превращений ВВ при низкоскоростных механических воздействиях и слабыми ударными волнами посредством формирования вязкопластических течений // *Физика горения и взрыва.* — 2018. — Т. 54, № 5. — С. 65–75.
10. **Khasainov V. A., Borisov A. A., Ermolaev B. S., Korotkov A. I.** Two-phase viscoplastic model of shock initiation of detonation in high density pressed explosives // *Proc. 7th Symp. (Int.) on Detonation.* — 1981. — P. 435–447.
11. **Belmas R., Plotard J. P.** Physical origin of hot spots in pressed explosive compositions // *J. Phys. IV.* — 1995. — V. 05, N C4. — P. 61–87. — DOI: <https://doi.org/10.1051/jp4:1995406>.
12. **Massoni J., Saurel R.** A mechanistic model for shock initiation of solid explosives // *Phys. Fluids.* — 1999. — V. 11, N 3. — P. 710–736. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.869941>.
13. **Najjar F. M., Howard W. M., Fried L. E., Manaa M. R., Nichols III A., Levesque G.** Computational study of 3-D hot-spot initiation in shocked insensitive high-explosive // *AIP Conf. Proc.* — 2012. — P. 255–258. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3686267>.
14. **Levesque G. A., Vitello P.** The effect of pore morphology on hot spot temperature // *Propell., Explos., Pyrotech.* — 2015. — V. 40, N 2. — P. 303–308. — DOI: <https://doi.org/10.1002/prep.201400184>.
15. **Austin R. A., Springer H. K., Fried L. E.** Grain-scale simulation of shock initiation in composite high explosives // *Energ. Mater.* — 2017. — V. 25. — P. 243–270. — DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-319-59208-4_8.

16. **Springer H. K., Bastea S., Nichols III A. L., Tarver C. M., Reaugh J. E.** Modeling the effects of shock pressure and pore morphology on hot spot mechanisms in HMX // Propell., Explos., Pyrotech. — 2018. — V. 43, N 8. — P. 805–817. — DOI: <https://doi.org/10.1002/prop.201800082>.
17. **Menikoff R., Sewell T. D.** Constituent properties of HMX needed for mesoscale simulations // Combust. Theory Modell. — 2002. — V. 6, N 1. — P. 103–125. — DOI: <https://doi.org/10.1088/1364-7830/6/1/306>.
18. **Swell T. D., Menikoff R.** Complete equation of state for beta-HMX and implications for initiation // AIP Conf. Proc. — 2004. — P. 157–162. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1780207>.
19. **Menikoff R.** Pore collapse and hot spots in HMX // AIP Conf. Proc. — 2004. — P. 393–396. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1780261>.
20. **Kapahi A., Udaykumar H. S.** Dynamics of void collapse in shocked energetic materials: physics of void-void interactions // Shock Waves. — 2013. — V. 23. — P. 537–558. — DOI: <https://doi.org/10.1007/s00193-013-0439-6>.
21. **Rai N. K., Udaykumar H. S.** Three-dimensional simulations of void collapse in energetic materials // Phys. Rev. Fluids. — 2018. — V. 3. — P. 033201. — DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.3.033201>.
22. **Tarver C. M., Chidester S. K., Nichols III A. L.** Critical conditions for impact- and shock-induced hot spots in solid explosives // J. Phys. Chem. — 1996. — V. 100. — P. 5794–5799. — DOI: <https://doi.org/10.1021/jp953123s>.
23. **LS-DYNA Theory Manual.** — 2006.
24. **Dick J. J., Martinez A. R., Hixson R. S.** Plane impact response of PBX-9501 and its components below 2 GPa // Tech. Rep. LA-13426-MS, Los Alamos National Laboratory. — 1998. — DOI: <https://doi.org/10.2172/663187>.
25. **Dick J. J., Menikoff R.** Analysis of wave profiles for single-crystal cyclotetramethylene tetranitramine // J. Appl. Phys. — 2005. — V. 97. — P. 023529. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1828602>.
26. **Dick J. J., Martinez A. R.** Elastic precursor decay in HMX explosive crystals // AIP Conf. Proc. — 2002. — P. 817. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1483662>.
27. **Dick J. J., Hooks D. E., Menikoff R., Martinez A. R.** Elastic-plastic wave profiles in cyclotetramethylene tetranitramine crystals // J. Appl. Phys. — 2004. — V. 96. — P. 374–379. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1757026>.
28. **Yoo C., Cynn H.** Equation of state, phase transition, decomposition of β -HMX (octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine) at high pressures // J. Chem. Phys. — 1999. — V. 111, N 22. — P. 10229–10235. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.480341>.
29. **Tran T. D., Simpson R. L., Maienschein J., Tarver C.** Thermal decomposition of Trinitrotoluene (TNT) with a new one-dimensional time to explosion (ODTX) apparatus // 32nd Int. Annu. Conf. of Inst. of Chem. Technol. — 2001.
30. **Zhi X. Q., Hu S. Q., Xiao Z. H., Xu S. P., Li J. J.** Effects of sealing conditions on fast cook-off response properties of passive RDX // Chin. J. Explos. Propell. — 2010. — V. 33, N 1. — P. 31–34.
31. **Tarver C. M., McGuire R. R., Lee E. L., Wrenn E. W., Brein K. R.** The thermal decomposition of explosives with full containment in one-dimensional geometries // 17th Symp. (Int.) on Combust. — 1979. — P. 1407–1413. — DOI: [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(79\)80132-0](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(79)80132-0).
32. **McGuire R. R., Tarver C. M.** Chemical-decomposition models for the thermal explosion of confined HMX, TATB, RDX, and TNT explosives // 7th Symp. (Int.) on Detonation. — 1981.
33. **Tarver C. M., Tran T. D.** Thermal decomposition models for HMX-based plastic bonded explosives // Combust. Flame. — 2004. — V. 137, N 1-2. — P. 50–62. — DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2004.01.002>.
34. **Tarver C. M., Koerner J. G.** Effects of endothermic binders on times to explosion of HMX- and TATB-based plastic bonded explosive // J. Energ. Mater. — 2007. — V. 26, N 1. — P. 1–28. — DOI: <https://doi.org/10.1080/07370650701719170>.

Поступила в редакцию 25.09.2019.

После доработки 22.05.2020.

Принята к публикации 26.05.2020.