

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВРЕМЕНИ ДО ВОСПЛАМЕНЕНИЯ  
ДЛЯ ОБРАЗЦОВ ИЗ ПРЕССОВАННОГО  
ТЕТРАНITРОПЕНТАЭРИТРИТА****Н.И. Карманов<sup>1</sup>, О.В. Койнов<sup>1</sup>, Е.В. Помыкалов<sup>2</sup>, С.В. Фролова<sup>1</sup>**<sup>1</sup>ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТИФ им. академ. Е.И. Забабахина», г. Снежинск,

Российская Федерация

<sup>2</sup>Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск,

Российская Федерация

В статье рассматривается проблема определения времени до воспламенения для взрывчатого вещества (ВВ) тетранитропентаэритрита (ТЭН) при тепловом воздействии. ТЭН относится к классу нитроэфирных ВВ, которые характеризуются низкой термостойкостью. Для данного ВВ выбрана наиболее простая модель терморазложения – модель простого автокатализа. Данная модель описывает основные аспекты терморазложения нитроэфиров – каталитическое влияние продуктов распада на скорость разложения исходного ВВ. На основе выбранной модели предлагается способ определения кинетических параметров с использованием известных экспериментальных данных по статическому нагреву сферических образцов прессованного ТЭНа. Данный способ включает в себя два этапа. На первом этапе с помощью выражения для периода индукции предварительно оцениваются кинетические параметры. Затем эти параметры существенно уточняются в ходе проведения численных расчетов. Для описания всего набора экспериментальных данных предлагается аррениуссовская зависимость энергии активации от температуры. С использованием полученного набора кинетических параметров и выбранной модели терморазложения удовлетворительно описаны результаты экспериментов по динамическому нагреву цилиндрических образцов ТЭНа.

*Ключевые слова:* воспламенение; терморазложение; ODTX; ВВ; ТЭН; кинетические параметры; период индукции.

**Введение**

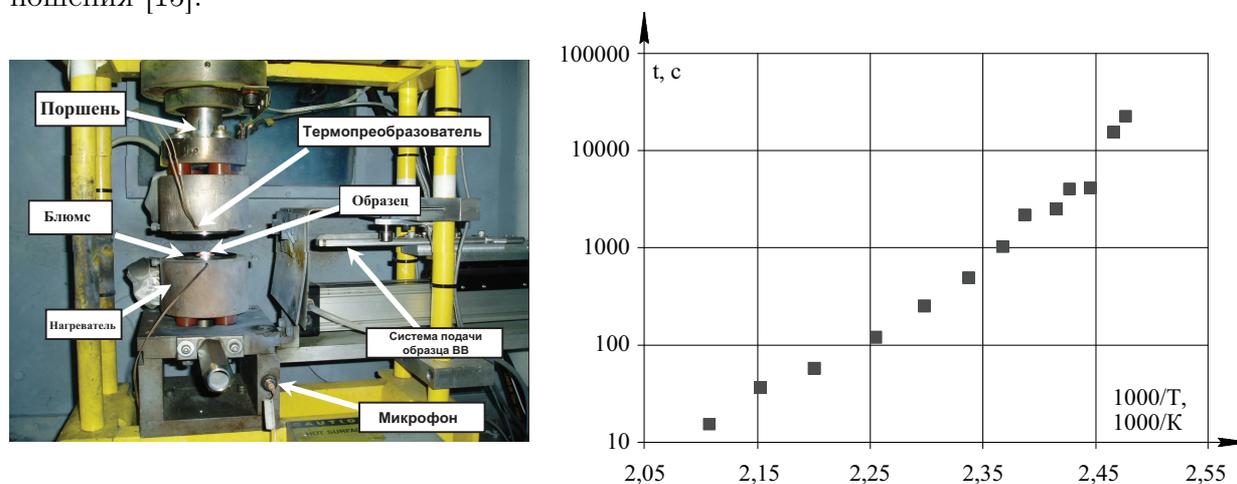
Изделия, содержащие вторичные взрывчатые вещества (ВВ) (тротил, тетранитропентаэритрит (ТЭН), гексоген, октоген и т.д.), многие десятилетия используются как в гражданской, так и в военной промышленности. С самого начала использования вторичных ВВ возникла проблема их безопасного хранения и эксплуатации. Аварии, связанные с пожарами на военных и гражданских складах ВВ, происходят достаточно часто [1–3]. Поэтому проблемы безопасного обращения с аварийными изделиями, попадающими в тепловое поле пожара, и прогнозирование дальнейшего хода развития событий после возникновения интенсивной химической реакции в ВВ, являются актуальными.

При воздействии теплового поля пожара на изделие можно выделить два этапа. Первый этап – этап прогрева, в ходе которого происходит повышение температуры всех элементов изделия. Вследствие этого происходит разупрочнение, деформация, плавление и термическое расширение материалов, разложение ВВ [4–6]. Длительность этого этапа – от нескольких минут до нескольких часов. Второй этап – воспламенение ВВ и распространение по нему экзотермической реакции. Длительность этого этапа – от нескольких минут до десятков минут, если происходит спокойное

выгорание ВВ, от десятков до сотен микросекунд, если после воспламенения ВВ возникает взрыв [4–8].

Обратимся к проблеме первого этапа – определение времени до воспламенения. Для этого необходимо знать теплофизические свойства и калорийность ВВ, а также кинетические характеристики ВВ. Обычно теплофизические параметры ВВ хорошо известны [9]. Для определения кинетических параметров (энергии активации и предэкспоненциальные множители) необходимы данные по экспериментам, где ВВ подвергается заданному тепловому воздействию вплоть до воспламенения. Например, в США для калибровки кинетических параметров используется ODTX-методика [10]. Суть ее заключается в следующем (рис. 1): сферический образец ВВ  $\varnothing 1,27$  см ( $r=0,635$  см) помещается в массивные цилиндрические алюминиевые блямсы, имеющие полусферические выемки и нагретые до определенной температуры (100–300 °С). После этого фиксируется время от момента размещения образца ВВ в блямсах до момента воспламенения. В ходе опыта ВВ испытывает терморазложение в герметичных условиях. В опытах варьируется только температура блямсов. На рис. 1 также приведены экспериментальные данные для ВВ ТЭН.

Для описания экспериментальных данных, полученных по ODTX-методике, можно использовать модели многостадийного (3,4 стадии) разложения ВВ [11–14] либо простые одностадийные модели, в которых бы учитывались наиболее значимые аспекты терморазложения ВВ [10, 15–18]. Одностадийные модели зачастую удобнее использовать при анализе реальных изделий, для них получены аналитические соотношения [15].

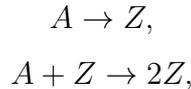


**Рис. 1.** Постановка ODTX-экспериментов [9] и экспериментальная зависимость времени до воспламенения от температуры алюминиевых блямсов  $T_b$  в координатах  $lg(t) - 1000/T$  для ТЭНа [13]

Рассмотрим процесс терморазложения такого ВВ как ТЭН [13]. ТЭН интересен в том отношении, что он является основным компонентом некоторых ВВ, используемых в военном деле [19]. К тому же ТЭН к моменту воспламенения может расплавляться в достаточно большом количестве, что способствует легкому переходу горения во взрыв [20]. ТЭН, наряду с нитроглицерином и диэтиленгликольдинитратом, относится к классу нитроэфиров. В отличие от других нитроэфиров ТЭН при комнатной температуре и до температур 120–130 °С находится в твердом состоянии, что обуславливает его высокую термостойкость [20]. Известно, что при терморазложении и при развитии теплового взрыва в конденсированных ВВ важную роль играют автокаталитические реакции [20]. Для ТЭНа и других нестойких нитроэфиров это особенно актуально, поэтому при рассмотрении процесса терморазложения автокаталитичность процесса необходимо учитывать [13].

## 1. Постановка задачи по определению времени до воспламенения

Для описания экспериментальных данных [13] воспользуемся моделью простого автокатализа, в которой схема разложения исходного ВВ выглядит следующим образом:



где  $A$  – исходное вещество (ВВ),  $Z$  – продукт реакции (катализирующий агент), накапливающееся в ходе реакции и ускоряющий разложение  $A$ . Скорость реакции в данном случае запишется как [15]:

$$\frac{d[A]}{dt} = -z \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) [A](1 - [A] + [Z]_0), \quad (1)$$

где  $[A]$  – относительная массовая концентрация исходного вещества  $A$ ,  $t$  – время (с),  $z$  – предэкспоненциальный множитель ( $1/с$ ),  $E$  – энергия активации (Дж/моль),  $R$  – универсальная газовая постоянная (Дж/моль·К),  $T$  – температура (К),  $[Z]_0$  – начальная относительная массовая концентрация катализирующего агента. Для численного определения времени до воспламенения по ОДТХ-экспериментам необходимо в дополнение к уравнению (1) решать уравнение теплопроводности с аррениусовским источником тепла [15]:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(\lambda \nabla T) + Q z \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) [A](1 - [A] + [Z]_0), \quad (2)$$

где  $\rho$  – плотность (кг/м<sup>3</sup>),  $c$  – теплоемкость (Дж/кг·К),  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности (Вт/м·К),  $Q$  – тепловой эффект реакции (Дж/м<sup>3</sup>).

Начальные и граничные условия для уравнений (1) и (2) применительно к ОДТХ-экспериментам выглядят следующим образом:

$$T_{t=0} = 293K, [A]_{t=0} = 1, T_{r=b} = T_6, \nabla T_{r=0} = 0, \nabla [A]_{r=b} = [A]_{r=0} = 0, \quad (3)$$

где  $T_{t=0}$  – температура образца ВВ в момент времени  $t=0$ ,  $T_{r=b}$  – температура на границе сферического образца ВВ (на радиусе  $b=0,635$  см),  $T_6$  – температура блюмсов,  $\nabla T_{r=0}$  – градиент температуры в центре образца (на радиусе  $r=0$ ),  $\nabla [A]_{r=b}$ ,  $\nabla [A]_{r=0}$  – градиенты концентраций исходного вещества на границе образца и в его центре.

Уравнения (1) и (2) решаются численно. Значения теплофизических параметров для ТЭНа, можно найти в [13]. Кинетические параметры  $E$  и  $z$  следует подобрать таким образом, чтобы расчетные данные удовлетворительно соответствовали экспериментальным данным [13]. После нахождения кинетических параметров, можно приступать к решению реальных задач, связанных с нагревом изделий, содержащих ТЭН. Ниже будет показан путь отыскания оптимальных значений параметров  $E$  и  $z$  для прессованного ТЭНа.

## 2. Обработка экспериментальных данных

В теории горения широко используется понятие периода индукции – времени достижения максимума скорости химической реакции в ВВ или времени до возникновения воспламенения [15]. При расчете периода индукции считается, что и ВВ,

и окружающая среда в начальный момент времени имеют одну и ту же температуру, причем у окружающей среды эта температура остается постоянной в течение всего процесса разложения ВВ вплоть до момента воспламенения. Применительно к ODTX-экспериментам [10] окружающая среда – это массивные алюминиевые блюмсы.

Выражения для периода индукции можно использовать при обработке экспериментальных данных для предварительных оценок величин кинетических параметров  $E, z$ . В случае простого сильного автокатализа адиабатический период индукции записывается следующим образом [15]:

$$t_{ind}^{ad} = \frac{1}{z} \exp\left(\frac{E}{RT_6}\right) \ln\left(0,561 \frac{\gamma}{[Z]_0}\right), \quad (4)$$

где  $\gamma = \rho c(T_6)RT_6^2/QE$  – число Годеса ( $\gamma \sim 0,01-0,001$ ), характеризующее степень экзотермичности реакции разложения ВВ [15]. Условие сильного автокатализа записывается следующим образом:  $[Z]_0 \ll \gamma$  [15]. Формулу (4) можно использовать для аппроксимации экспериментальных результатов (рис. 1) по методу наименьших квадратов, определяя при этом параметры  $E, z$ , которые затем можно использовать при решении уравнений (1), (2).

Как видно из уравнения (4) в координатах  $\ln(t_{ind}^{ad}) - 1/T_6$  мы должны получить прямую линию, если ВВ разлагается в соответствии со схемой простого автокаталитического распада. Однако экспериментальные точки не ложатся на прямую линию, что указывает на более сложный характер распада ТЭНа. Действительно, ТЭН при атмосферном давлении плавится в диапазоне температур 139 – 141 °С, а скорость распада в расплаве ТЭНа выше, чем в твердом состоянии [20], при этом продукты распада ускоряют плавление ТЭНа. Тем самым, желательно учесть изменчивый характер распада ВВ при различных температурах. Проще всего это сделать, если принять, что энергия активации зависит от температуры, например по Аррениусовскому закону:

$$E = E_0 \exp(n/T_6). \quad (5)$$

Тогда выражение для периода индукции запишем следующим образом:

$$t_{ind}^{ad} = \frac{1}{z} \exp\left(\frac{E_0 \exp(n/T_6)}{RT_6}\right) \ln\left(0,561 \frac{\rho c(T_6)RT_6^2}{QE_0 \exp(n/T_6)[Z]_0}\right). \quad (6)$$

Исходные теплофизические параметры для ТЭНа представлены в таблице.

Таблица

Теплофизические параметры для прессованного ТЭНа [13]

Коэффициент теплопроводности в зависимости от температуры, Вт/м·К						
$T, K$	298	373	413	473	623	>1273
$\lambda$	0,251	0,23	0,209	0,167	0,0418	0,0418
Теплоемкость в зависимости от температуры, Дж/кг·К						
$T, K$	298	373	413	473	623	>1273
$c$	1090	1170	1300	1420	1760	1760
Начальная концентрация катализирующего агента $[Z]_0$				$10^{-5}$		
Плотность $\rho, \text{кг/м}^3$				1700		
Тепловой эффект реакции $Q, \text{Дж/м}^3$				$9,952 \cdot 10^9$		
Теплота плавления $q, \text{Дж/кг}$				128000		

В результате аппроксимации экспериментальных данных получены следующие параметры:  $E_0=55,55$  Дж/моль,  $z=12,06$  1/с,  $n=2603$ . Результаты аппроксимации показаны на рис. 2. Отметим, что полученные величины  $E$ ,  $z$  не соответствуют каким-то реальным значениям, характерным для одностадийных реакций. С их помощью удается хорошо описать экспериментальные данные, и это отражает тот факт, что в реальности распад ВВ носит сложный характер.

Можно сказать, что соответствие между экспериментальными и расчетными данными удовлетворительное, учитывая, что в экспериментах времена до воспламенения при одной и той же температуре блюмсов могут отличаться друг от друга в 1,5 – 2 раза для октогенсодержащих ВВ [12].

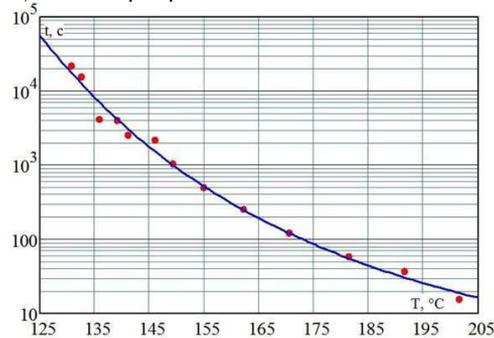


Рис. 2. Результат аппроксимации экспериментальных данных по формуле (6)

Теперь проведем расчеты по ОДТХ-экспериментам в программе конечно-объемного анализа ANSYS FLUENT, причем учтем теплоту плавления. Будем решать уравнения (1), (2) с граничными условиями (3), с учетом зависимости энергии активации от температуры (5). При учете плавления необходимо будет скорректировать кинетические параметры для получения оптимального результата. Для простоты мы будем изменять только величины  $E_0$  и  $z$ . Постановка расчетов показана на рис. 3. Характерный радиальный размер сетки – 0,3 мм. За момент воспламенения принят момент времени, когда расчетный шаг уменьшается с 1–10 с ниже 0,05 с, что соответствует температурам в зоне воспламенения 300–500 °C. Результаты расчетов показаны на рис. 4 для  $E_0=60,7$  Дж/моль,  $z=36,55$  1/с,  $n=2603$ . Также рассчитана критическая температура для образца ТЭНа, ниже которой воспламенение не произойдет. Она оказалась равной 119,7 °C. При этом время до воспламенения составило величину 373300 сек или 4,3 суток.

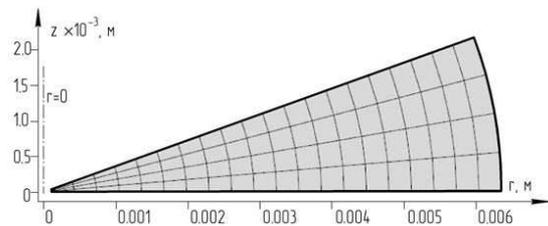


Рис. 3. Постановка расчетов

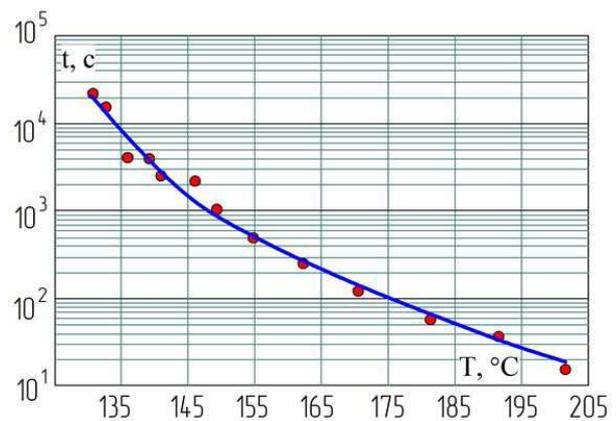


Рис. 4. Результаты численных расчетов по определению  $t_{расч}^{воспл}$  с учетом плавления

Среднеквадратичное отклонение (СКО) натуральных логарифмов экспериментальных времен до воспламенения от кривой  $t_{расч}^{воспл}$ , полученной при помощи численных расчетов с параметрами  $E_0=60,7$  Дж/моль,  $z=36,55$  1/с,  $n=2603$ , равно  $\sigma=0,257$ . Оно соответствует разбросу (95%) для времен до воспламенения в  $e^{2\cdot\sigma}=1,7$  раза относительно полученной кривой  $t_{расч}^{воспл}$ , что не противоречит экспериментальным данным [12, 13], получаемым по ODTX-методике [9]. Чтобы рассчитать времена  $t_{расч}^{+2\sigma}$  и  $t_{расч}^{-2\sigma}$  соответствующих 95% границам разброса времен до воспламенения относительно расчетных величин  $t_{расч}^{воспл}$ , необходимо вместо величины  $z$  в (1, 2) взять величины  $z_{-2\sigma} = ze^{2\cdot\sigma}$  и  $z_{+2\sigma} = z/e^{2\cdot\sigma}$ . С учетом СКО критическая температура для образца ТЭНа, ниже которой воспламенение не произойдет с вероятностью 97,5%, равна 117,6 °С.

### 3. Расчетное определение времени до воспламенения для цилиндрических образцов ТЭНа

Для проверки адекватности полученных кинетических параметров проведем численные расчеты по экспериментам [13], где цилиндрические образцы прессованного ТЭНа  $\varnothing 50,6$  мм  $\times$  50,6 мм, помещенные в негерметичный корпус, подвергались динамическому нагреву по различным законам нагрева корпуса  $T_{гр}(t)$  до воспламенения. Момент воспламенения фиксировался по резкому росту показаний термопреобразователей, размещенных внутри ВВ. Зависимости  $T_{гр}(t)$  представлены на рис. 5. Расчетная геометрия вместе с граничными условиями для температуры показана на рис. 6 (1/4 часть). Размер сетки – 0,5 мм. Решались уравнения (1, 2) с зависимостью энергии активации от температуры (5). Начальная температура – 20 °С. Теплофизические параметры взяты из таблицы 1. Кинетические параметры –  $E_0=60,7$  Дж/моль,  $z=36,55$  1/с,  $n=2603$ . На границе образца ТЭНа, на оси и плоскости симметрии задавался нулевой градиент относительной массовой концентрации  $\nabla[A]=0$ . За момент воспламенения принят момент времени, когда расчетный шаг уменьшается с 50 с ниже 0,05 с.

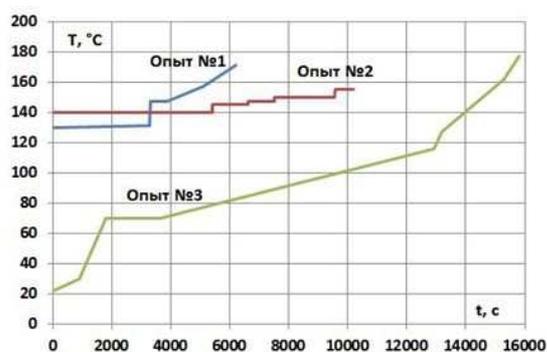


Рис. 5. Режимы нагрева  $T_{гр}(t)$

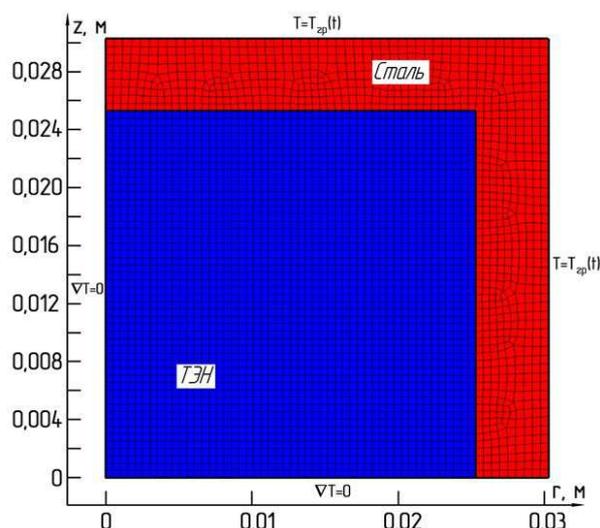
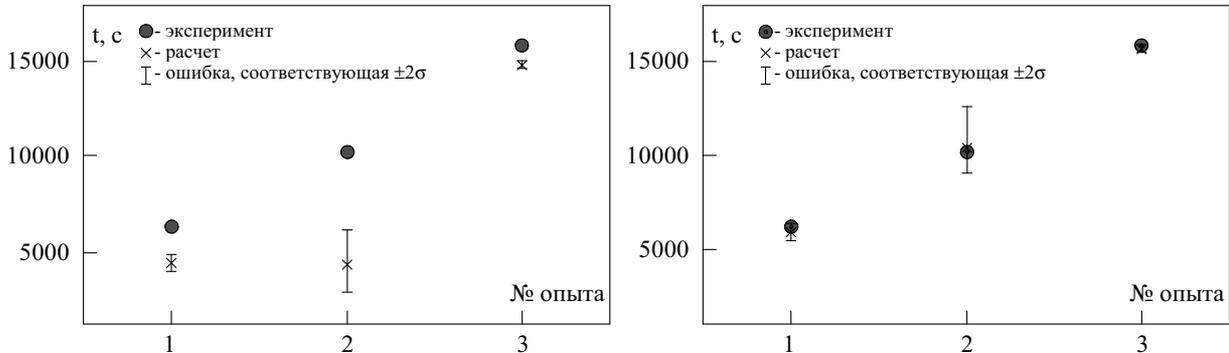


Рис. 6. Постановка расчетов

Результаты расчетов представлены на рис. 7. Расчетные времена  $t_{расч}^{воспл}$  с учетом разброса экспериментальных данных для ODTX-экспериментов ниже эксперимен-

тальных  $t_{\text{расч}}^{\text{воспл}}$ , что связано с тем, что опыты проводились в негерметичном корпусе, а кинетические параметры определялись для ОДТХ-экспериментов в герметичных условиях. Негерметичность в расчетах можно учесть, уменьшив величину  $z=36,55$  1/с в некоторое количество раз. Например, для первого опыта уменьшим величину  $z$  настолько, чтобы расчетные и экспериментальные времена совпали. Затем проведем расчеты для оставшихся опытов с новой величиной  $z$ . Результаты таких расчетов с  $z=36,55/8$  1/с представлены на рис. 8. Как видно из рис. 8, расчетные данные теперь удовлетворительно соответствуют экспериментальным данным.



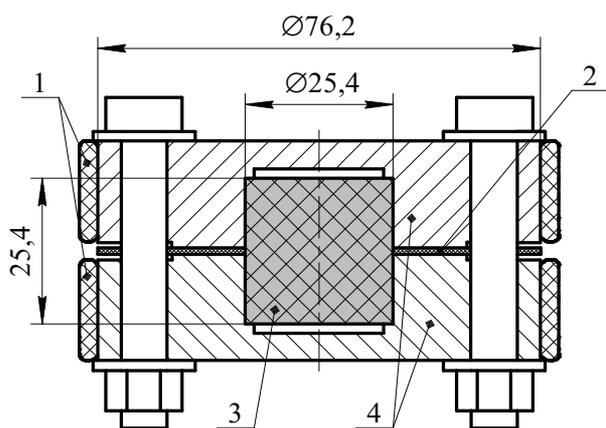
**Рис. 7.** Результаты численных расчетов с исходной величиной  $z=36,55$  1/с,  $z_{-2\sigma} = ze^{2\cdot\sigma}$ ,  $z_{+2\sigma} = ze^{2\cdot\sigma}$   
**Рис. 8.** Результаты численных расчетов с исходной величиной  $z=36,55/8$  1/с,  $z_{-2\sigma} = ze^{2\cdot\sigma}$ ,  $z_{+2\sigma} = ze^{2\cdot\sigma}$

Теперь обратимся к СИТИ-экспериментам [21, 22]. Постановка экспериментов показана на рис. 9. В этих опытах нагревались образцы из прессованного ТЭНа  $\varnothing 25,4$  мм  $25,4$  мм, помещенные в герметичные алюминиевые корпуса. Для конкретного опыта на внешней поверхности корпуса задавался определенный закон нагрева  $T_{\text{гр}}(t)$ . Момент воспламенения фиксировался по резкому росту показаний термопреобразователей, размещенных внутри ВВ, или по возникновению взрыва. Начальная температура –  $20$  °С. Торцевые поверхности корпуса теплоизолировались. Расчетная геометрия (1/4 часть) показана на рис. 10 вместе с граничными условиями для температуры. На границе образца ТЭНа, на оси и плоскости симметрии задавался нулевой градиент относительной массовой концентрации  $\nabla[A]=0$ . Характерный размер сетки в ВВ –  $0,5$  мм. За момент воспламенения принят момент времени, когда расчетный шаг уменьшается с  $50$  с ниже  $0,05$  с. Для понимания отличия между полной герметичностью и полной негерметичностью использовались величины  $z=36,55$  1/с и  $z=36,55/8$  1/с. Результаты экспериментов и численных расчетов представлены на рис. 11.

С учетом погрешности ОДТХ-методики и погрешности, связанной с извлечением экспериментальных данных из [21, 22], можно сказать, что соответствие между экспериментальными и расчетными данными для  $z=36,55$  1/с (полная герметичность) удовлетворительное.

Во всех опытах осуществлялся, нагрев сборки от  $20$  °С до температуры выдержки  $T_{\text{выд}}$  в течение  $600$  с. В опытах № 1 – 5, 7 производилась выдержка на  $T_{\text{выд}}$  до воспламенения. В опыте № 6 осуществлялась выдержка на  $T_{\text{выд}}$  в течение  $1,9$  часа, затем нагрев со скоростью  $21,4$  °/мин до воспламенения. В опыте № 8 осуществлялась выдержка на  $T_{\text{выд}}$  в течение  $5$  часов, затем нагрев со скоростью  $18$  °/мин до воспламенения.

На рис. 12 показаны профили температуры в образце ВВ на различные моменты времени. Расчеты относятся к опыту № 5 из рис. 11.



- 1 - Нагреватели
- 2 - Уплотнительное кольцо
- 3 - Образец ТЭНа
- 4 - Алюминиевый корпус

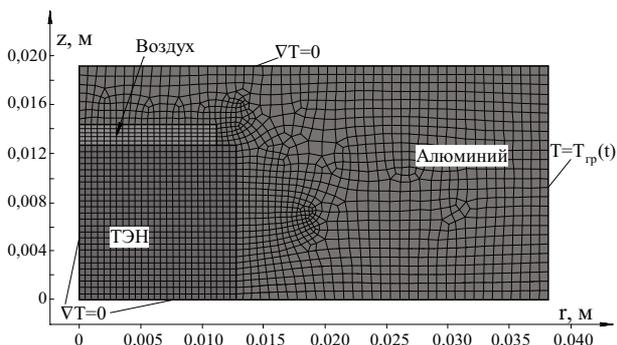


Рис. 10. Расчетная геометрия

Рис. 9. Постановка СИТ1-экспериментов

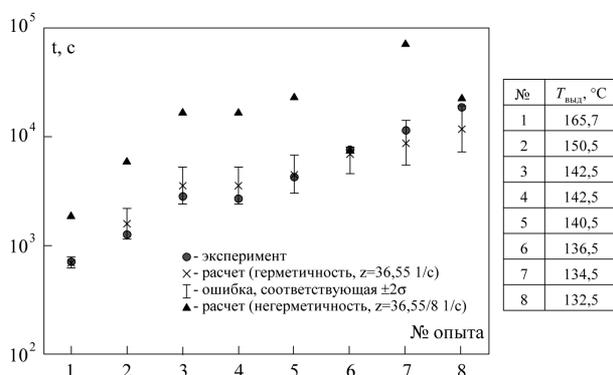


Рис. 11. Сравнение экспериментальных данных из [21, 22] с результатами численных расчетов с учетом герметичности ( $z=36,55 \text{ л/с}$ ,  $z_{-2\sigma} = ze^{2\cdot\sigma}$ ,  $z_{+2\sigma} = ze^{2\cdot\sigma}$ )

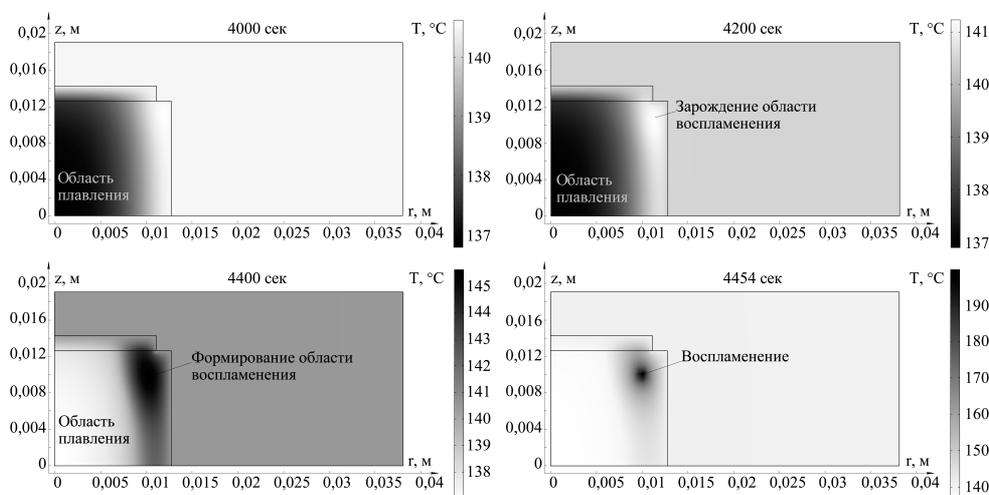


Рис. 12. Тепловое поле внутри сборки на различные времена

## Заключение

Предложенная модель терморазложения с предложенной зависимостью энергии активации от температуры удовлетворительно описывают результаты экспериментов [13, 21, 22] по определению времени до воспламенения образцов ТЭНа. Тем самым предложенную модель можно использовать для предсказания времени до воспламенения для реальных изделий, содержащих ВВ на основе ТЭНа.

## Литература

1. Кондриков, Б.Н. Технологическая безопасность на стыке веков / Б.Н. Кондриков. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2006.
2. Doherty, R. Insensitive Munition – Coming of Age / R. Doherty, D. Watt // Proceedings of the 35th International Annual Conference ICT. – Karlsruhe. – 2004. – V. 086. – P. 1–12.
3. Жилин, В.Ф. Малочувствительные взрывчатые вещества / В.Ф. Жилин, В.Л. Збарский, Н.В. Юдин. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2008.
4. Asay, V. Shock Wave Science and Technology Reference Library. Vol. 5. Non Shock Initiation of Explosives / V. Asay. – Heidelberg; Dordrecht; London; New York: Springer, 2010.
5. Chidester, S. On the Violence of Thermal Explosion in Solid Explosives / S. Chidester, C. Tarver, L. Green, P. Urtiew // Combustion and Flame. – 1997. – V. 110, № 1/2. – P. 264–280.
6. McClelland, M. ALE3D Simulation of Heating and Violence in a Fast Cookoff Experiment with LX-10 / M. McClelland, J. Maienschein, W. Howard, A. Nichols, M. de Haven, O. Strand // Proceedings of the 13th International Detonation Symposium. – Norfolk. – 2006. – P. 606–617.
7. Беляев, А.Ф. Переход горения конденсированных систем во взрыв / А.Ф. Беляев, В.К. Боболев, А.И. Коротков, А.А. Сулимов, С.В. Чуйко. – М.: Наука, 1973.
8. Ермолаев, Б.С. Конвективное горение и низкоскоростная детонация пористых энергетических материалов / Б.С. Ермолаев, А.А. Сулимов. – М.: Топус Пресс, 2017.
9. Dobratz, V. LLNL Explosives Handbook: Properties of Chemical Explosives and Explosive Simulants / V. Dobratz, P. Crawford. – Livermore: Lawrence Livermore National Laboratory, 1985.
10. Peter Cheazone Hsu. The ODTX System for Thermal Ignition and Thermal Safety Study of Energetic Materials / Peter Cheazone Hsu, G. Hust, M. Howard, J. Maienschein // Proceedings of the 14th International Detonation Symposium. – Coeur d'Alene, 2010. – P. 984–990.
11. McGuire, R. Chemical Decomposition Models for the Thermal Explosion of Confined HMX, TATB, RDX, and TNT Explosives / R. McGuire, C. Tarver // Proceedings of the 7th Symposium (International) on Detonation. – Annapolis, 1981. – P. 56–64.
12. Tarver, C. Thermal Decomposition Models for HMX-based Plastic Bonded Explosives / C. Tarver, T. Tran // Combustion and Flame. – 2004. – V. 137, № 1. – P. 50–62.
13. Tarver, C. Thermal Decomposition of Pentaerythritol Tetranitrate / C. Tarver, T. Tran, R. Whipple // Propellants, Explosives, Pyrotechnics. – 2003. – V. 28, № 4. – P. 189–193.
14. Tarver, C. Effects of Endothermic Binders on Times to Explosion of HMX- and TATB-Based Plastic Bonded Explosives / C. Tarver, J. Koerner // Journal of Energetic Materials. – 2008. – V. 26, № 1. – P. 1–28.
15. Рябинин, В.К. Математическая теория горения / В.К. Рябинин. – Челябинск: Издат. центр ЮУрГУ, 2014.
16. McClelland, M. ALE3D Simulation of Incompressible Flow, Heat Transfer and Chemical Decomposition of Comp B in Slow Cookoff Experiments / M. McClelland, E. Glascoe, A. Nichols, S. Schofield, H. Springer // Proceedings of the 15th International Detonation Symposium. – San Francisco. – 2014. – P. 1196–1206.

17. Зуев, Ю.С. Определение кинетических параметров для твердого октогенсодержащего взрывчатого вещества по результатам ОДТХ-экспериментов / Ю.С. Зуев, Н.И. Карманов, Е.В. Недоспасова // Вестник Концерна ВКО «Алмаз – Антей». – 2018. – Т. 25, № 2. – С. 53–59.
18. Зуев, Ю.С. Определение кинетических параметров для прессованного тетранитропентаэритрита по результатам ОДТХ-экспериментов / Ю.С. Зуев, Н.И. Карманов // Вестник Концерна ВКО «Алмаз – Антей». – 2019. – Т. 29, № 2. – С. 57–63.
19. Орленко, Л.П. Физика взрыва. Том I / Л.П. Орленко. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.
20. Андреев, К.К. Термическое разложение и горение взрывчатых веществ / К.К. Андреев. – М.: Наука, 1966.
21. Hobbs, M. PETN Ignition Experiments and Models / M. Hoobs, W. Wentz, M. Kaneshige // Journal of Physical Chemistry A. – 2010. – V. 114, № 16. – P. 5306–5319.
22. Hobbs, M. Correlating Cookoff Violence with Pre-Ignition Damage / M. Hoobs, W. Wentz, M. Kaneshige // Proceedings of the 14th International Detonation Symposium. – Coeur d'Alene, 2010. – P. 164–173.

Николай Иванович Карманов, сотрудник, федеральное государственное унитарное предприятие «Российский федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина», karmanovnik@mail.ru.

Олег Васильевич Койнов, сотрудник, федеральное государственное унитарное предприятие «Российский федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина», oleg6481@mail.ru.

Евгений Валерьевич Помыкалов, ассистент кафедры вычислительной механики, Южно-Уральский государственный университет (г. Челябинск, Российская Федерация), pomykalovev@susu.ru.

Светлана Владимировна Фролова, сотрудник, федеральное государственное унитарное предприятие «Российский федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина», frolovasvetta@mail.ru.

*Поступила в редакцию 5 сентября 2024 г.*

MSC 80A25

DOI: 10.14529/mmp250107

## DETERMINATION OF THE TIME TO IGNITION FOR SAMPLES FROM PRESSED TETRANITROPENTAERYTHRITOL

*N.I. Karmanov<sup>1</sup>, O.V. Koynov<sup>1</sup>, E.V. Pomykalov<sup>2</sup>, S.V. Frolova<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>RFNC-VNIITF, Snezhinsk, Russian Federation

<sup>2</sup>South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: karmanovnik@mail.ru, oleg6481@mail.ru, pomykalovev@susu.ru, frolovasvetta@mail.ru

The article deals with the problem of determining the time to ignition for explosive tetranitropentaerythritol (TEN) under thermal exposure. TEN belongs to the class of

nitroester explosives, which are characterized by low temperature resistance. The simplest thermal decomposition model, the simple autocatalysis model, was chosen for this explosive. This model describes the main aspects of thermal decomposition of nitroesters – the catalytic effect of decomposition products on the decomposition rate of the initial explosive. Based on the selected model, a method is proposed for determining kinetic parameters using known experimental data on static heating of spherical samples of compressed heating elements. This method includes two stages. At the first stage, kinetic parameters are preliminarily estimated using the expression for the induction period. Then these parameters are significantly refined during numerical calculations. An Arrhenius dependence of the activation energy on temperature is proposed to describe the entire set of experimental data. Using the obtained set of kinetic parameters and the selected thermal decomposition model, the results of experiments on dynamic heating of cylindrical heating element samples are satisfactorily described.

*Keywords: ignition; thermal decomposition; ODTX; explosive; TEN; kinetic parameters; induction period.*

## References

1. Kondrikov B.N. *Tehnologicheskaja bezopasnost' na styke vekov* [Technological Safety at the Turn of the Century]. Moscow, Russian Chemical Technical University Named after D.I. Mendeleev, 2006. (in Russian)
2. Doherty R., Watt D. Insensitive Munition – Coming of Age. *Proceedings of the 35th International Annual Conference ICT*, Karlsruhe, 2004, vol. 086, pp. 1–12.
3. Zhilin, V.F., Zbarskij V.L., Judin N.V. *Malochuvstvitel'nye vzryvchatye veshhestva* [Insensitive Explosives]. Moscow, Russian Chemical Technical University Named after D.I. Mendeleev, 2008. (in Russian)
4. Asay B. *Shock Wave Science and Technology Reference Library. Vol. 5. Non Shock Initiation of Explosives*. Heidelberg, Dordrecht, London, New York, Springer, 2010. DOI: 10.1007/978-3-540-87953-4
5. Chidester S., Tarver C., Green L., Urtiew P. On the Violence of Thermal Explosion in Solid Explosives. *Combustion and Flame*, 1997, vol. 110, no. 1/2, pp. 264–280. DOI: 10.1016/S0010-2180(97)00071-0
6. McClelland M., Maienschein J., Howard W., Nichols A., de Haven M., Strand O. ALE3D Simulation of Heating and Violence in a Fast Cookoff Experiment with LX-10. *Proceedings of the 13th International Detonation Symposium*, Norfolk, 2006, pp. 606–617.
7. Beljaev A.F., Bobolev V.K., Korotkov A.I., Sulimov A.A., Chujko S.V. *Perehod gorenija kondensirovannyh sistem vo vzryv* [Transition of Combustion of Condensed Systems into Explosion]. Moscow, Nauka, 1973. (in Russian)
8. Ermolaev B.S., Sulimov A.A. *Konvektivnoe Gorenje i Nizkoskorostnaja Detonacija Poristyh Jenergeticheskikh Materialov* [Convective Combustion and Low-Velocity Detonation of Porous Energetic Materials]. Moscow, Torus Press, 2017. (in Russian)
9. Dobratz B., Crawford P. *LLNL Explosives Handbook: Properties of Chemical Explosives and Explosive Simulants*. Livermore, Lawrence Livermore National Laboratory, 1985.
10. Peter Cheazone Hsu, Hust G., Howard M., Maienschein J. The ODTX System for Thermal Ignition and Thermal Safety Study of Energetic Materials. *Proceedings of the 14th International Detonation Symposium*, Coeur d'Alene, 2010, pp. 984–990.
11. McGuire R., Tarver C. Chemical Decomposition Models for the Thermal Explosion of Confined HMX, TATB, RDX, and TNT Explosives. *Proceedings of the 7th Symposium (International) on Detonation*, Annapolis, 1981, pp. 56–64.
12. Tarver C., Tran T. Thermal Decomposition Models for HMX-Based Plastic Bonded Explosives. *Combustion and Flame*, 2004, vol. 137, no. 1, pp. 50–62. DOI: 10.1016/j.combustflame.2004.01.002

13. Tarver C., Tran T., Whipple R. Thermal Decomposition of Pentaerythritol Tetranitrate. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2003, vol. 28, no. 4, pp. 189–193. DOI: 10.1002/prop.200300004
14. Tarver C., Koerner J. Effects of Endothermic Binders on Times to Explosion of HMX- and TATB-Based Plastic Bonded Explosives. *Journal of Energetic Materials*, 2008, vol. 26, no. 1, pp. 1–28. DOI: 10.1080/07370650701719170
15. Rjabinin V.K. *Matematicheskaja teorija gorenija* [Mathematical Theory of Combustion]. Chelyabinsk, SUSU Publishing Center, 2014. (in Russian)
16. McClelland M., Glascoe E., Nichols A., Schofield S., Springer H. ALE3D Simulation of Incompressible Flow, Heat Transfer and Chemical Decomposition of Comp B in Slow Cookoff Experiments. *Proceedings of the 15th International Detonation Symposium*, San Francisco, 2014, pp. 1196–1206.
17. Zuev Ju.S., Karmanov N.I., Nedospasova E.V. [Determination of Kinetic Parameters for Solid Octogen-Containing Explosives Based on the Results of ODTX Experiments]. *Vestnik Koncerna VKO "Almaz – Antej"*, 2018, vol. 25, no. 2, pp. 53–59. (in Russian)
18. Zuev Ju.S., Karmanov N.I. [Determination of Kinetic Parameters for Solid Octogen-Containing Explosives based on the Results of ODTX Experiments]. *Vestnik Koncerna VKO "Almaz – Antej"*, 2019, vol. 29, no. 2, pp. 57–63. (in Russian)
19. Orlenko L.P. *Fizika vzryva. Tom I.* [Explosion Physics. Vol. I]. Moscow, FIZMATLIT, 2004. (in Russian)
20. Andreev K.K. *Termicheskoe razlozhenie i gorenje vzryvchatyh veshhestv* [Thermal Decomposition and Combustion of Explosives]. Moscow, Nauka, 1966. (in Russian)
21. Hoobs M., Wentz W., Kaneshige M. PETN Ignition Experiments and Models. *Journal of Physical Chemistry A*, 2010, vol. 114, no. 16, pp. 5306–5319.
22. Hoobs M., Wentz W., Kaneshige M. Correlating Cookoff Violence with Pre-Ignition Damage. *Proceedings of the 14th International Detonation Symposium*, Coeur d'Alene, 2010, pp. 164–173.

*Received September 5, 2024*