

梯恩梯/黑索今 (35/65) 炸药 的反应速率函数

赵 锋 孙承纬 卫玉章 池家春
(西南流体物理研究所)

摘要 本文采用 Lagrange 分析方法和冲击引爆实验数据研究了 TNT/RDX (35/65) 炸药的反应速率函数。在冲击压力 4.69 GPa (持续时间约 1 μ s) 的作用下, 采用 F4/203A 型锰铜压力计测量了样品内六个不同 Lagrange 位置上的压力历史。以此作为输入量, 采用 Lagrange 分析方法计算了反应流场中的速度、密度和比内能历史。根据这些结果, 再使用 HOM、JWL 和 γ 律爆轰产物状态方程计算了反应进程和反应速率。在此基础上采用最小二乘法拟合了 Forest Fire 和 Cochran 点火-成长速率函数中的待定系数。考察了不同产物状态方程对这些系数的影响。用 HOM 和 JWL 方程得到的速率函数, 基本一致, 但用 γ 律方程得到的速率比前两者低, 这是由于在反应区中有明显熵增的缘故。在较高压力下, 本文给出的 Forest Fire 速率同 Mader 依据 POP 关系和反应 Hugoniot 算出的 Comp. B 炸药的结果有一定差别。使用得到的这两种速率函数进行了一维数值模拟计算, 计算结果同实验基本一致。

关键词 爆轰 反应速率函数 拉格朗日分析 冲击引爆

1. 引言

近二、三十年来, 炸药在军事和国民经济中应用日益广泛, 使得爆轰物理的研究得到迅速发展。爆轰物理的基本问题之一是研究炸药在爆轰反应下的力学和物理运动过程, 即和化学反应相耦合的流体力学问题。目前, 这种耦合主要采用唯象的反应速率函数来描写。因此, 研究反应速率函数对于炸药的安全使用, 引发炸药爆轰反应, 控制其能量释放率和了解爆轰波结构具有重大意义。

早在本世纪四十年代, Von. Neumann, Зельдович 等就提出了数学上易于处理的反应速率函数 ($d\lambda/dt = 2(1-\lambda)^{1/2}$)。以后人们使用化学动力学中的 Arrhenius 反应速率来数值模拟冲击引爆过程, Eyring 通过研究有限直径圆筒内传播的爆轰波的曲率半径来研究反应速率函数。1976年 Mader 和 Forest 以炸药 POP 关系和反应 Hugoniot 关系为基础提出了仅依赖于压力的 Forest Fire 反应速率关系, 用来描述非均质炸药的冲击引爆过程。近十多年来, 国外提出了不少唯象反应速率函数形式, 如 Cochran、Chan 和 Lee、Tarver 提出的点火-成长反应速率函数, 这类反应速率函数由点火项和成长项组成, 第一项描述爆轰建立过程中流体力学热点的反应, 第二项描述了炸药颗粒的燃烧, 反映了与单纯热点增殖不同的爆轰建立过程的物理图象。由于炸药化学反应性质复杂, 这些反应速率函数都存在一定的局限性^[1]。

近年来,冲击引爆研究方法的进展之一是所谓Lagrange分析方法。在被实验的样品中装入一组应力或速度传感器记录反应冲击波演变过程,用Lagrange分析方法处理这种记录,可得到该过程中反应产物粒子的压力、比容、速度和比内能历史及剖面。结合给定的状态方程,还能计算出流场中的化学反应进程及反应速率值。该方法自Fowles和Williams^[2], Cowperthwaite^[3]及Grady^[4]创立以来,在材料本构关系和冲击起爆动力学研究方面得到了广泛运用。

本文采用Lagrange分析方法和冲击引爆实验得到的压力历史数据对TNT/RDX(35/65)炸药的反应速率函数进行了计算。根据Forest Fire和Cochran点火-成长反应速率函数形式,拟合了其中的待定系数,所得结果同文献结果进行了比较,并作了一维数值模拟,两者都肯定了本文确定的反应速率计算结果。

2. Lagrange 分析方法

(1) 守恒方程组及其积分

Lagrange分析方法是把拉氏量计(传感器)测量结果同运动守恒方程组相结合的一种不定常数值方法。在Lagrange坐标中平面一维的流体力学基本方程组是

$$\frac{\partial v}{\partial t} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial u}{\partial h} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial h} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{p}{\rho_0} \frac{\partial u}{\partial h} = 0 \quad (3)$$

其中 ρ_0 为粒子初始密度, u 为速度, v 为比容, p 为压力, t 为时间, h 为粒子初始位置或Lagrange坐标, e 为比内能,沿粒子迹线在短时间间隔 $\Delta t = t_2 - t_1$ 内积分守恒方程(1)~(3)得到

$$v_2 = v_1 + \frac{1}{\rho_0} \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial u}{\partial h} \right)_i dt \quad (4)$$

$$u_2 = u_1 - \frac{1}{\rho_0} \int_{t_2}^{t_1} \left(\frac{\partial p}{\partial h} \right)_i dt \quad (5)$$

$$e_2 = e_1 - \frac{1}{\rho_0} \int_{t_1}^{t_2} p \left(\frac{\partial u}{\partial h} \right)_i dt \quad (6)$$

利用方向微分关系式

$$\left(\frac{\partial}{\partial h} \right)_i = \left(\frac{d}{dh} \right)_i - \left(\frac{\partial}{\partial t} \right)_h \left(\frac{dt}{dh} \right)_i \quad (7)$$

代入积分方程组(4)~(6)得到

$$v_2 = v_1 + \frac{1}{\rho_0} \int_{t_1}^{t_2} \left[\left(\frac{du}{dh} \right)_i - \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_h \left(\frac{dt}{dh} \right)_i \right] dt \quad (8)$$

$$u_2 = u_1 - \frac{1}{\rho_0} \int_{t_2}^{t_1} \left[\left(\frac{dp}{dh} \right)_i - \left(\frac{\partial p}{\partial t} \right)_h \left(\frac{dt}{dh} \right)_i \right] dt$$

$$e_2 = e_1 - \frac{1}{\rho_0} \int_{t_1}^{t_2} p \left[\left(\frac{du}{dh} \right)_j - \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_h \frac{dt}{dh} \right] dt \quad (10)$$

其中“()_j”表示沿径线求导^[4]。引入径线的目的在于更好地计算方程组(4)~(6)中跨越传感器线(粒子剖面)的导数,选取径线时应注意把记录历史上的相似点取为编号相同的节点。若在两条径线之间的时间间隔上采用一阶数值微商

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t} \right)_h = \frac{p_{j+1,k} - p_{j,k}}{t_{j+1,k} - t_{j,k}} \quad (11)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_h = \frac{u_{j+1,k} - u_{j,k}}{t_{j+1,k} - t_{j,k}} \quad (12)$$

其中下标 j 表示第 j 条径线, k 表示第 k 个传感器,把(11)和(12)式代入(8)~(10)式得到如下计算公式

$$v_{j+1,k} - v_{j,k} = \frac{v_0}{2} \left[\left(\frac{du_{j,k}}{dh} + \frac{du_{j+1,k}}{dh} \right) (t_{j+1,k} - t_{j,k}) - (u_{j+1,k} - u_{j,k}) \left(\frac{dt_{j,k}}{dh} + \frac{dt_{j+1,k}}{dh} \right) \right] \quad (13)$$

$$u_{j+1,k} - u_{j,k} = -\frac{v_0}{2} \left[\left(\frac{dp_{j,k}}{dh} + \frac{dp_{j+1,k}}{dh} \right) (t_{j+1,k} - t_{j,k}) - (p_{j+1,k} - p_{j,k}) \left(\frac{dt_{j,k}}{dh} + \frac{dt_{j+1,k}}{dh} \right) \right] \quad (14)$$

$$e_{j+1,k} - e_{j,k} = -\frac{v_0}{4} (p_{j,k} + p_{j+1,k}) \left[\left(\frac{du_{j,k}}{dh} + \frac{du_{j+1,k}}{dh} \right) (t_{j+1,k} - t_{j,k}) - (u_{j+1,k} - u_{j,k}) \left(\frac{dt_{j,k}}{dh} + \frac{dt_{j+1,k}}{dh} \right) \right] \quad (15)$$

这组公式的特点是简单明确,便于程序处理。选择冲击波迹线为第一条径线,初始数据由实验数据和冲击波关系得到。

(2) 反应进程 λ 及反应速率 R 的计算

假定爆轰反应是单道单向放热反应,其进程(爆变过程)由变量 λ 描述, $\lambda = 0, 1$, 分别表示反应未开始及已完成状态。反应速率 $R = d\lambda/dt$ 是反应混合物热力学量以及 λ 的函数。我们以固态 HOM 方程^[5]描述未反应炸药状态,用 HOM, JWL 及 γ 律方程^[6]描述爆轰产物状态。假定部分反应产物是炸药和产物的某种混合物,混合规定如下

$$v = \lambda v^p + (1 - \lambda) v^x \quad (16)$$

$$e = \lambda e^p + (1 - \lambda) e^x \quad (17)$$

其中上标 p 表示产物, x 表示炸药,还假定这两相处于压力和温度平衡之下

$$\begin{aligned} p^p &= p^x = p \\ T^p &= T^x = T \end{aligned} \quad (18)$$

混合物的 p, v, e 由流体力学方程组及有关状态方程计算,通过迭代到自洽,便可计算出

反应进程 λ , 温度 T , 通过 λ 对时间的数值微商便得到反应速率 R 。

采用上述处理方法得到的反应速率同产物状态方程具有紧密的联系, 不同的状态方程可能导出不同的反应速率。后面将给出几种不同形式产物状态方程计算结果。

3. 压力历史的测量

实验装置如图 1 所示。炸药样品的初始密度为 $1.710 \pm 0.008 \text{ g/cm}^3$, 直径为 60 mm。由炸药平面波透镜产生的冲击波经有机玻璃和钢片衰减后, 驱动离体铝飞片起爆炸药, 冲击炸药的入射压力为 4.69 GPa。使用 F4/203 A 型锰铜压力计^[6]记录了 $h = 0.00 \text{ mm}, 3.00 \text{ mm},$

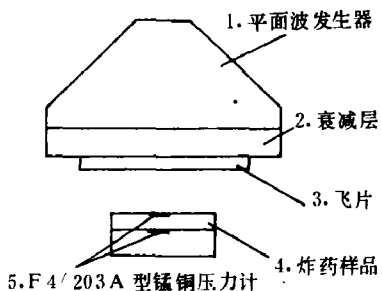


图 1 实验装置

Fig. 1 Experimental assembly

- 1. Explosive lens; 2. Attenuator;
- 3. Flyer; 4. Explosive sample;
- 5. F4/203 A type manganin gauges

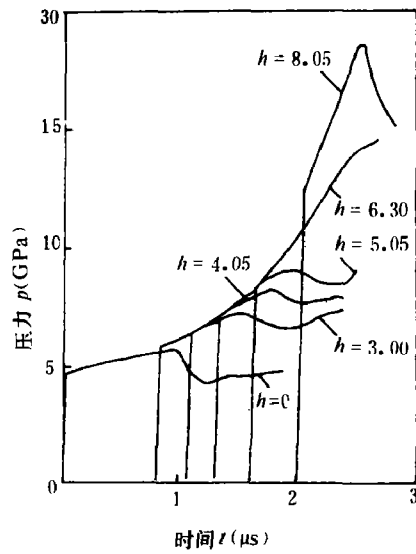


图 2 实验测量的压力历史

Fig. 2 Measured pressure histories at $h = 0.0 \text{ mm}, 3.00 \text{ mm}, 4.05 \text{ mm}, 5.05 \text{ mm}, 6.30 \text{ mm}, 8.05 \text{ mm}$

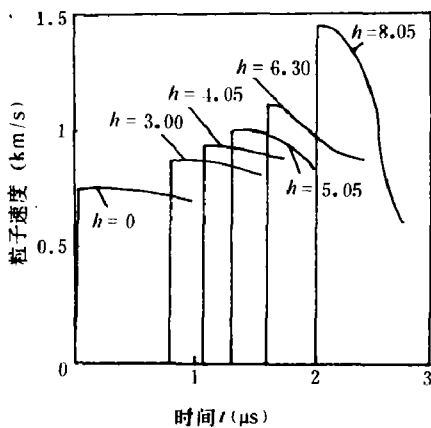


图 3 计算的粒子速度

Fig. 3 Calculated particle velocities

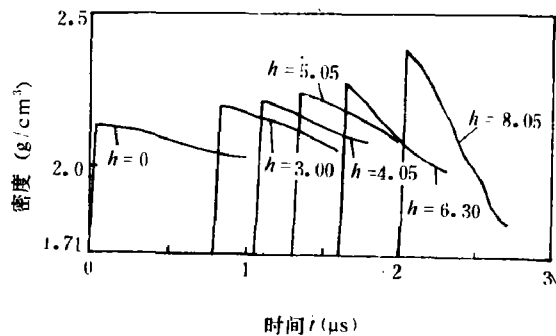


图 4 计算的密度历史

Fig. 4 Calculated density histories

4.05 mm, 5.05 mm, 6.30 mm, 8.05 mm 六个 Lagrange 位置上的压力历史, 实验结果如图 2 所示, 压力测量值的标准偏差为 2%。

4. Lagrange 分析和反应速率的计算结果

图 2 的数据作为 Lagrange 分析的输入, 计算得到的粒子速度、密度和比内能历史分别如图 3, 4 和 5 所示。

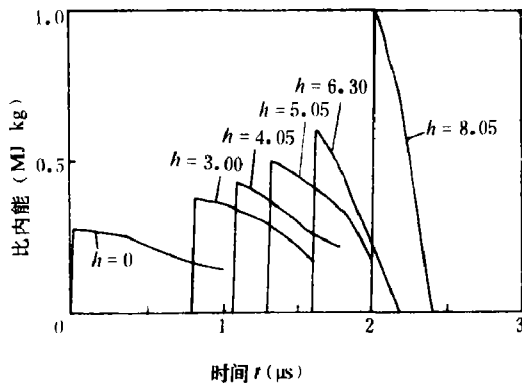


图 5 计算的比内能历史

Fig. 5 Calculated specific internal energy histories

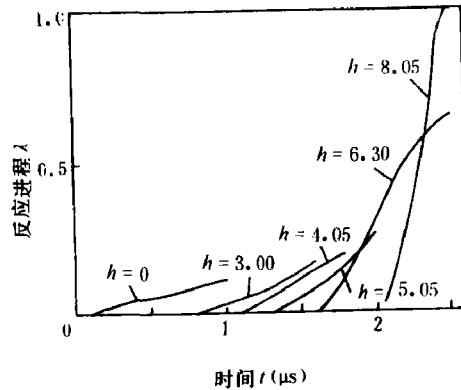


图 6 计算的反应进程历史

Fig. 6 Calculated reaction degree histories

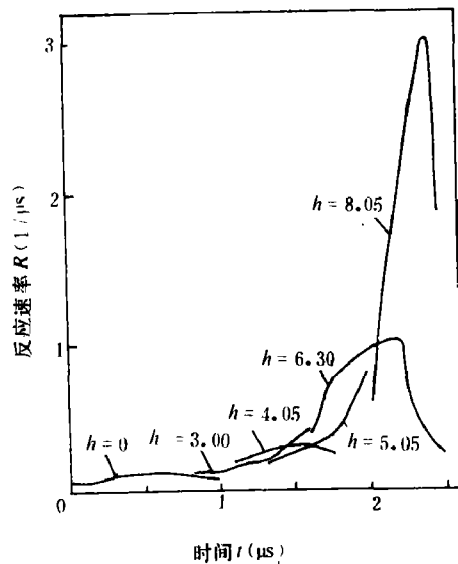


图 7 计算的反应速率历史

Fig. 7 Calculated reaction rate histories

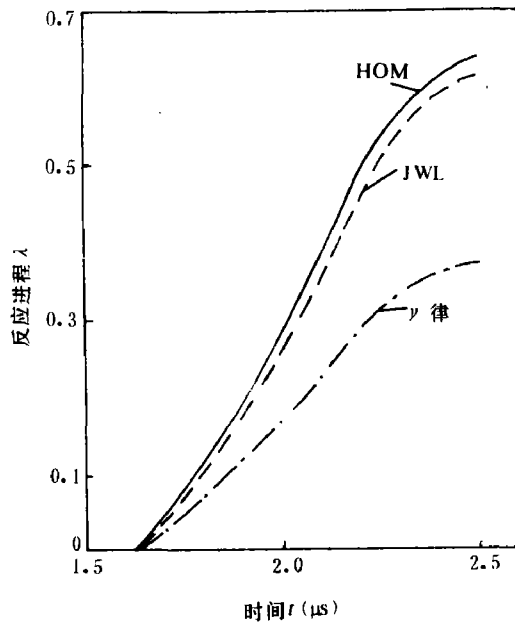


图 8 $h = 6.30$ mm 处由不同产物状态方程计算的反应进程

Fig. 8 Reaction rates at $h = 6.30$ mm calculated with HOM, JWL and γ -Law EOS

产物状态方程取HOM形式，计算得到的反应进程 λ 和反应速率 R 如图6和图7所示。

产物状态方程分别取HOM、JWL和 γ 律，计算得 $h=6.30$ mm处的 λ 示于图8。

从图8中三种结果比较可知，反应进程 λ 对产物取HOM或JWL方程是不敏感的，或者说两者结果基本一致。产物取 γ 律方程时， λ 则要低得多，可能的原因是 γ 律方程基本上反映产物等熵膨胀过程，而非均质炸药的冲击引爆过程中反应冲击波逐渐增长，熵增明显是变动的。

5. 反应速率函数的拟合

对爆轰过程的研究，特别是冲击引爆过程的研究，关键问题之一是确定反应速率函数，它决定了过程的行为和特征。反应速率函数的形式是多种多样的，从炸药模型的不同层次和不同引爆机制出发，可导致不同的反应速率函数形式。国外学者已经提出了几十种不同的唯象反应速率形式，其中Forest Fire反应速率和Cochran等提出的点火-成长反应速率形式简单，用于数值模拟非均质凝聚炸药的冲击引爆过程也获得一定的成功。Mader和Forest以实验的反应Hugoniot关系和冲击引爆的POP关系为基础，经过一定推导，提出速率仅同反应冲击波的阵面压力有关，反映了流体动力学热点的作用。这个仅同压力有关的唯象反应速率，被称为Forest Fire^[7]，具体形式为

$$\frac{1}{1-\lambda} \frac{d\lambda}{dt} = \exp(a_0 + a_1 p + a_2 p^2 + \dots + a_n p^n) \quad (19)$$

其中 a_i ($i=0, 1, 2, \dots, n$) 为常数。

点火-成长的机制及反应速率形式，最早是Lee和Tarver等提出的。他们认为在反应的最早阶段，点火项是主要的，过程与流体动力学热点相仿。以后转入成长阶段，过程类似

表 1 拟合得到的 Forest Fire 反应速率的系数

Table 1 Calculated coefficients in the Forest Fire reaction rate

爆轰产物 状态方程	n	$a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$	*
HOM	8	$-2.7537338 \times 10^{-1}, 1.8491797 \times 10^{-2}, 6.3516375 \times 10^{-4},$ $-2.6479220 \times 10^{-6}, 4.8291408 \times 10^{-7}, -4.7835827 \times 10^{-8},$ $2.6702738 \times 10^{-9}, -7.9066972 \times 10^{-9}, 9.6753213 \times 10^{-9}$	1
JWL	8	$-5.5567627, -1.9082148 \times 10^{-3}, 1.4703850 \times 10^{-5},$ $-4.477469 \times 10^{-6}, 7.2381024 \times 10^{-7}, -6.7400115 \times 10^{-8},$ $3.6298586 \times 10^{-9}, -1.0512699 \times 10^{-10}, 1.2683645 \times 10^{-10}$	2
γ 律	8	$-3.1259079 \times 10^{-1}, 7.5889453 \times 10^{-2}, 3.2965563 \times 10^{-4},$ $-1.8687860 \times 10^{-6}, 3.7155632 \times 10^{-7}, -3.8364006 \times 10^{-8},$ $2.1889940 \times 10^{-9}, -6.5409597 \times 10^{-9}, 7.9912141 \times 10^{-9}$	3
文献 [5]值 (Mader)	13	$-1.0354580 \times 10^{-1}, 4.7342745 \times 10^{-2}, -1.6753704 \times 10^{-4}, 4.4756746 \times 10^{-5},$ $-8.4931472 \times 10^{-6}, 1.1555934 \times 10^{-8}, -1.1402565 \times 10^{-9}, 8.2065911 \times 10^{-9},$ $-4.2986627 \times 10^{-10}, 1.6183794 \times 10^{-11}, -4.2605817 \times 10^{-11}, 7.4376767 \times 10^{-11},$ $-7.7289849 \times 10^{-11}, 3.6167776 \times 10^{-11}$	4

* 图9曲线号

于燃烧, 大约与压力成线性关系。这种速率函数有多种形式, 本文采用的是 Cochran 和 Chan 提出的形式^[9]:

$$\frac{1}{1-\lambda} \frac{d\lambda}{dt} = \omega_1 p^n + \omega_2 \lambda p^m \quad (20)$$

其中 ω_1 , ω_2 和 n 是待定常数, m 通常取 1。第一项描述点火, 第二项是描述反应的成长。使用这一反应速率计算的压力剖面 and 引爆距离, 引爆判据能与实验结果相符合。本文使用最小二乘法对上述两种速率函数形式进行了拟合, 得到了其中的待定系数。

(1) Forest Fire 反应速率

拟合计算结果如表 1 所示。图 9 是根据这些系数绘制的 $\lg p \sim \lg [d\lambda / (1-\lambda) dt]$ 曲线。从图 9 可知, HOM 和 JWL 方程计算的曲线基本一致, γ 律方程的曲线相对于其它几条曲线则偏低, 本文的曲线相对于文献 [5] 的曲线出现了一定的起伏, 其原因一方面是由于数据处理造成的, 另一方面可能是没有使用 POP 关系等假设引起的, 改善这种情况可以采用多次磨光的方法。

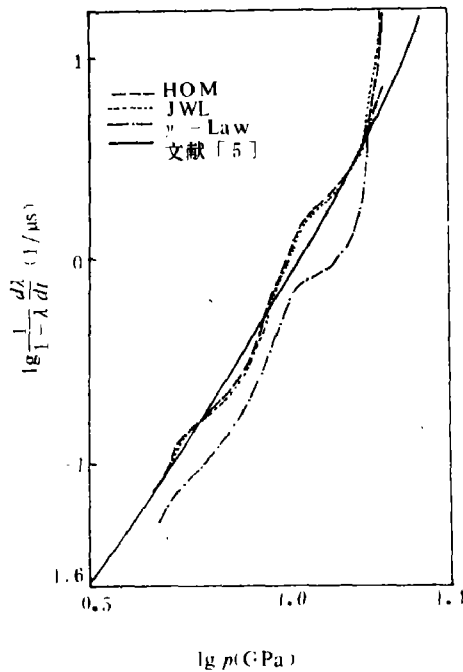


图 9 产物状态方程分别取 HOM、JWL、 γ 律方程拟合 Forest Fire 反应速率得到的 $\lg [d\lambda / (1-\lambda) dt] = \lg p$ 曲线

Fig. 9 The Forest Fire's $\lg [d\lambda / (1-\lambda) dt] = \lg p$ curves fitted by using the HOM, JWL and γ -Law EOS of detonation products respectively

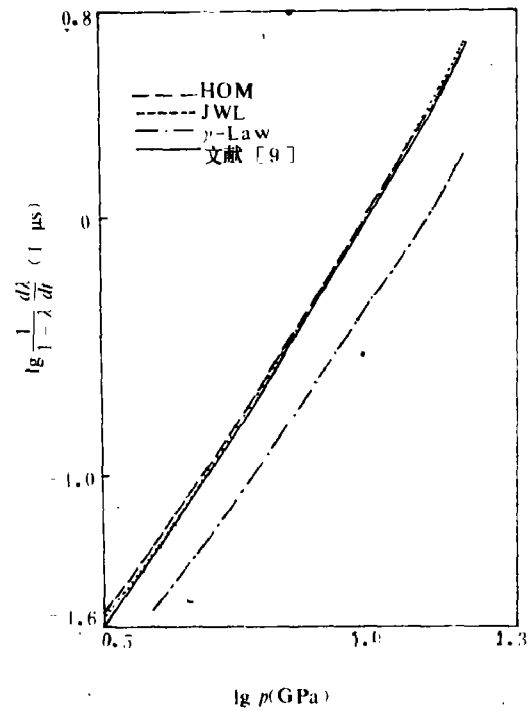


图 10 产物状态方程分别取 HOM、JWL 和 γ 律方程拟合 Cochran 点火-成长反应速率得到的 $\lg [d\lambda / (1-\lambda) dt] = \lg p$ 曲线

Fig. 10 The Cochran ignition-growth rates $\lg [d\lambda / (1-\lambda) dt] = \lg p$ curves fitted by using the HOM, JWL and γ -Law EOS of detonation products respectively

(2) Cochran 点火-成长反应速率

本文参考文献 [9], 取定 $\omega_2 = 20$, 拟合计算结果如表 2 所示。图 10 是根据这些系数绘制的 $\lg p \sim \lg [d\lambda / (1 - \lambda) dt]$ 曲线。与前面结果相似, JWL 和 HOM 方程的曲线基本重合, 它们同文献 [9] 的曲线非常接近, 仅稍微高一点, γ 律的曲线则明显低于其它曲线。

(3) 一维数值模拟与实验压力历史的比较

使用一维流体力学计算编码 SSS^[10], 采用表 1 和表 2 中 HOM 产物状态方程的两种反应速率函数进行数值模拟, 结果分别如图 11 和图 12 所示。图 11 和图 12 都表示 $h = 0.0 \text{ mm}$ 和 $h = 8.05 \text{ mm}$ 两个 Lagrange 位置的

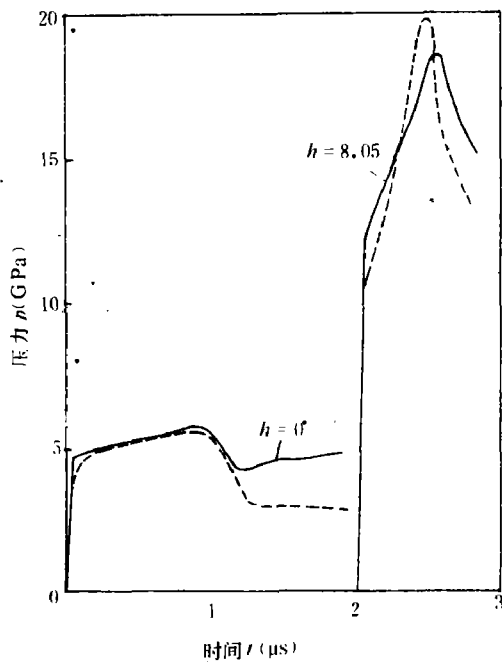


图 11 实验和 Forest Fire 反应速率计算的压力历史
——实验值, ----计算值

Fig. 11 Pressure histories; experimental and calculated with the Forest Fire rate
——Measured value, ----Calculated value

$h = 8.05 \text{ mm}$ 两个 Lagrange 位置的 压力历史。实验给出的压力历史因飞片的有限厚度而在加载脉冲之后出现稀疏作用区, 对于无稀疏作用的区域, 实验同计算基本符合。在受稀疏作用的区域, 两种反应速率的计算结果稍有差别。Forest Fire 速率计算的 $h = 0.0 \text{ mm}$ 的压力历史没有出 现实验观测到的尾部压力回升现象, 原因在于该反应速率函数仅以压力作为反应速率的依赖量 (一阶反应假定),

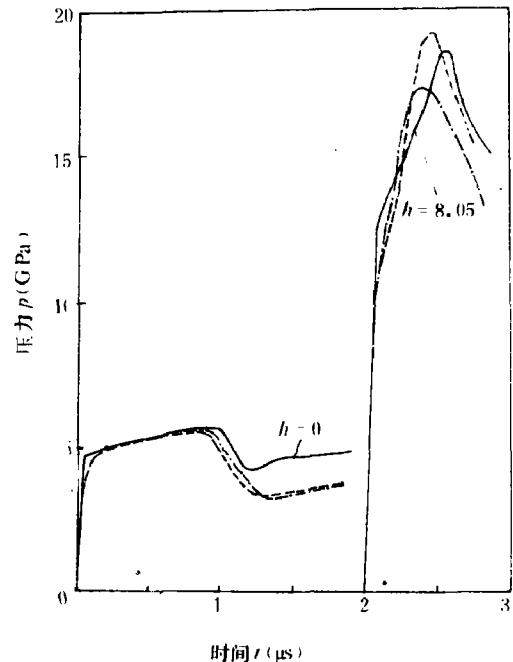


图 12 实验和 Cochran 的点火-成长模型计算的压 力历史

——实验值, ----计算值, ——根据文献 [9] 的系数的计算值

Fig. 12 Pressure histories; experimental and calculated with the Cochran's ignition-growth rate
——Measured value, ----Calculated value, ——Calculated value according to the coefficient of reference [9]

表 2 拟合得到的Cochran反应速率函数的系数
Table 2 Calculated coefficients in the Cochran's
Ignition-growth reaction rate

爆轰产物状态方程	ω_1	n	ω_2
HOM	2127.0503	3.52877	20
JWL	2126.8413	3.549699	20
γ 律 ($\gamma = 2.706$)	1081.1262	3.895631	20
文献 [9] 值	2390	3.6	20

而没有考虑产物浓度对反应速率的贡献。相比之下, Cochran 点火-成长速率的计算结果稍好一些。

姚炳龄等同志在实验方面给予很大帮助。在此表示感谢。

参 考 文 献

- [1] 张丕亭, 李维新, 私人通信 (1983)。
- [2] Fowles, R., Williams, R. F., *J. Appl. Phys.* **41** (1) (1970), 360.
- [3] Cowperthwaite, M., Williams, R. F., *J. Appl. Phys.* **42** (1) (1971), 456.
- [4] Grady, D. E., *J. Geophys. Res.*, **78** (8) (1973), 1299.
- [5] Mader, C. L., Numerical Modeling of Detonations, Chapter 4, Univ. of California Press, (1979).
- [6] 池家春, 吴国栋, 爆炸与冲击, **3** (3) (1983), 75.
- [7] Mader, C. L., Forest, C. A., LA-6259 (1976).
- [8] Cochran, S. G., Chan J., UCID-18024 (1979).
- [9] 孙承伟, 炸药反应速率函数的数值拟合 (待发表)。
- [10] 孙承伟, 一维冲击波和爆轰波计算程序 SSS, 计算物理, **3** (2) (1986), 142.

REACTION RATES OF TNT/RDX(35/65)explosive

Zhao Feng, Sun Chengwei, Wei Yuzhang, Chi Jiachun

(Southwest Institute of Fluid Physics)

ABSTRACT The reaction rates of TNT/RDX (35/65) explosive have been studied with the Lagrange analysis and shock initiation data. The explosive samples with diameter of 60mm were initiated under a shock of pressure 4.69 GPa and lasting time 1 μ s by means of a flyer driven by an explosive plane wave lens and an attenuator consisting of PMMA and steel slabs. The pressure histories at six Lagrange positions ($h = 0, 0$ mm, 3.00 mm, 4.05 mm, 5.05 mm, 6.30 mm, 8.05 mm) were measured by using the

F4/203A type manganin pressure gauges. These histories have been smoothed by the least square cubic B-spline method. With these input data the Lagrange analysis were performed and the histories of velocity, density and specific internal energy in the reactive flow have been obtained. Under the assumptions of pressure and temperature equilibrium, we denote the specific internal energy and volume of the reacting mixture as the weighted averages of those variables of unreacted explosive and detonation products, where the weight is the reaction degree to be calculated. The reaction degree and rates have been yielded by using the HOM, JWL as well as the γ -Law EOS (Equation of state) of detonation products.

Based on the tabular data for the pressure, density, specific internal energy, temperature, reaction degree and rates, some important empirical reaction rates could be determined. For examples, the coefficients in the Forest Fire rate and the ignition-growth rate suggested by S.G.Cochran and J.Chan were determined by the least square method. The influences of different EOS of detonation products on the rates have been investigated. The rates from HOM and JWL EOS are consistent with each other, however, the rate from γ -Law EOS is less than the above two in a wide range of pressure because the entropy increases considerably in the reaction zone. The Forest Fire rate shows some differences from that of comp. B explosive given by C.L.Mader's approximate calculation with the POP relation and the reaction Hugoniot. The result of the one-dimensional numerical simulation with the above rates are consistent well with the experimental data of shock initiation.

KEY WORDS detonation, reaction rate, Lagrange analysis, shock initiation.