

钝感炸药爆轰性能的数值模拟^{*}

孙锦山 曹菊珍 张铁桥 龚静号

(北京应用物理与计算数学研究所 北京 100088)

摘要 采用唯象反应率及相应状态方程对敏感与钝感两类炸药进行了数值模拟研究。结果表明:应用一般流体力学方程组的差分计算与反应率对释能过程的模拟,虽不能模拟爆轰波的精细结构及由此而引起的非理想效应,但仍能反映钝感炸药的部分性能。对数值模拟中的一些限制与条件,也进行了探讨。

关键词 爆轰理论 钝感炸药 爆轰数值模拟

中图分类号 O 242.1, TQ 564

1 引言

宏观、唯象化学反应速率的使用,使爆轰数值模拟能够对炸药引发、增长阶段的非理想过程进行定性和定量的研究。通常反应速率函数的构成,除 Forest Fire^[1]形式之外,均考虑了爆轰介质的部分点火、增长机制。但函数形式中的参数确定,正如文献[2]所述,它们都需要相应的实验数据进行调试和拟合。应用这种反应率及参数能否对偏离参数标定实验较大的一些实验进行正确的数值模拟,这是需要进一步论证并通过实验检验的。另外,唯象反应率关系并不完全反映爆轰的机制和内部物理量的本构关系,目前数值模拟的条件也不能描述波面精细结构。因此,在使用宏观、唯象反应速率对爆轰装置进行设计和研究爆轰性质时,必须作较深入的考察。

我们采用反应速率对敏感与钝感两类炸药进行数值模拟研究,目的之一为考察反应速率能否反映一维情况下,两种炸药的起爆性质及稳定爆轰时的爆速、爆压值。目的之二是考察二维情况钝感炸药所特有的爆轰性能,反应速率模拟是否能正确反映。最后讨论使用反应速率与流体力学方程组差分计算时,需要注意的几个问题。

2 研究的炸药和相应反应速率方程

研究两类炸药,敏感的以 PBX-9404 为代表,钝感的分别为 PBX-9502、X-0290、RX-03-BB 与 X-0219,它们含 TATB、前两种为 95%、后面分别为 92.5% 与 90%,其余成份为 Kel-F800。

唯象反应速率选用 Forest Fire 形式与点火-成核-增长的 Cochran 起爆函数^[3]。如文献[2]所述,反应速率方程与状态方程必须配套使用,这里前者使用 HOM 状态方程、后者使用 JWL 状态方程。

* 本课题部分由中国工程物理研究院科学基金资助。

1994年4月19日收到原稿,6月28日收到修改稿。

3 反应速率方程描述的爆轰特性

由上述状态方程和相应唯象反应速率方程,由 ZND 爆轰模型的假设,可以对下面的爆轰特性得到一些直观的概念。

3.1 平面一维定态爆轰波结构^[4]

使用平面一维爆轰波的雨贡纽关系式,将波前与波后的物理量联系起来。记 E_0, E_1 与 E_2 分别表示反应物波前、波后的内能以及波后产物的内能。波后成立局域压力平衡假定,故反应物与产物的压力均为 p, p_0 表示波前压力。 ρ 为密度、 $V=1/\rho$ 为比体积、 λ 为反应进程变量。雨贡纽关系为

$$(1 - \lambda)E_1 + \lambda E_2 - \lambda Q = \frac{1}{2}(p + p_0)(1 - V) + E_0 \quad (1)$$

这里 Q 为化学反应释放的能量。代入 JWL 状态方程,得到部分反应雨贡纽关系

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{2}(1 - V) - \frac{C_1}{D_1}\beta V - \frac{C_2}{D_2}(1 - \beta)V \right] p = \left[\left(\frac{A_1}{e_1 - 1} - \frac{A_1 C_1}{D_1} \right) \left(\frac{\beta V}{1 - \lambda} \right)^{1 - \epsilon_1} \right. \\ & + \left. \left(\frac{\beta_1}{1 - f_1} + \frac{B_1 C_1}{D_1} \right) \left(\frac{\beta V}{1 - \lambda} \right)^{1 - f_1} \right] (1 - \lambda) + \left\{ \left[\frac{A_2}{e_2} - \frac{A_2 C_2}{D_2} \frac{(1 - \beta)V}{\lambda} \right] \right. \\ & \times \exp \left[-e_2(1 - \beta)V/\lambda \right] + \left. \left[\frac{B_2}{f_2} - \frac{B_2 C_2}{D_2} \frac{(1 - \beta)V}{\lambda} \right] \exp \left[-f_2(1 - \beta)V/\lambda \right] \right\} \\ & \times \lambda - \lambda Q - D_1(1 - V) - E_0 \end{aligned} \quad (2)$$

其中: A_i, B_i, C_i, D_i, e_i 与 $f_i (i=1, 2)$ 为状态方程参数, β 为单位体积内反应物所占的体积分数,它由反应区内组份之间的压力平衡关系求得。

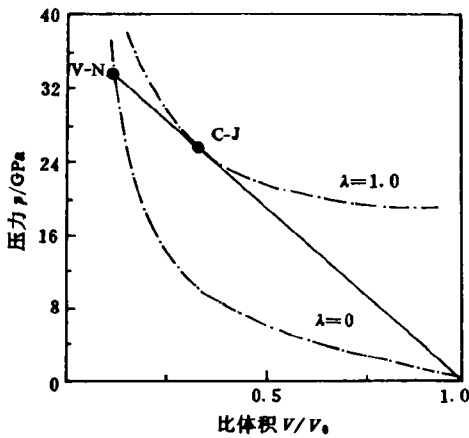


图 1 RX-03-BB 炸药的反应物、产物雨贡纽曲线与瑞利直线

Fig. 1 Hugoniot curves and Rayleigh line of RX-03-BB explosive, $\lambda=0$ for reactant and $\lambda=1$ for products

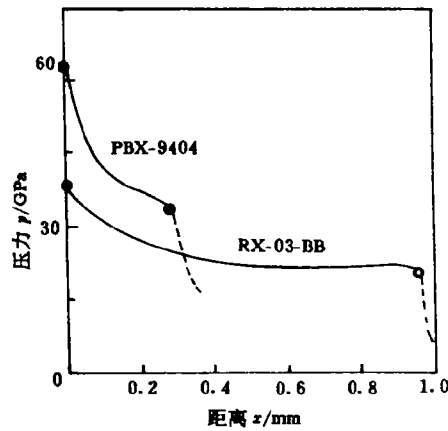


图 2 爆轰波结构内, PBX-9404 与 RX-03-BB 炸药的压力分布曲线, 点线为 C-J 点之后设想的稀疏波

Fig. 2 Pressure distribution of PBX-9404 and RX-03-BB explosives in the detonation structure

对不同的 λ 值,数值求解代数方程(2),可以得到如图 1 所示的雨贡纽曲线。过 $p=p_0$ 、 $V=V_0$ 点作瑞利直线与 $\lambda=1$ 的产物雨贡纽曲线相切,则可得到 V-N 尖与 C-J 点的状态。

由 JWL 状态方程参数和 Q 值,可得到 RX-03-BB 炸药的稳定爆轰波,其 V-N 尖上的压力为 35.8 GPa,而 C-J 压力为 27.0 GPa、爆速 7.5 km/s。类似求出 PBX-9404 炸药的 V-N 尖上压力是 61.3 GPa, C-J 压力为 36.5 GPa、爆速 8.8 km/s。可见,上述爆轰波特性参量无需反应速率就可以得到。但爆轰波反应区内的物理量分布及结构宽度,则需要反应速率的具体表达式,通过积分 $x = \int_0^\lambda u d\lambda / R(\lambda, p)$ 而求得。其中 R 为反应速率, x 为离波阵面的距离。对固定的反应进程变量 λ ,可由定常爆轰守恒关系求出相应物理量,然后再对 λ 积分求出波后距离。对 PBX-9404 与 RX-03-BB 两种炸药,积分得到反应区宽度分别为 0.27 mm 与 0.93 mm。反应区内的压力分布如图 2 所示。由此可见,敏感炸药的反应区宽约为钝感炸药的四分之一,反应区内压力分布的空间梯度也比钝感炸药的大得多。

3.2 波阵面曲率与爆速之间的关系

遵循文献[5]与文献[6]的研究方法,对大曲率半径情况,将坐标系建立在爆轰波面上,作拟定常一维球对称假定,得到以下控制方程

$$du/dx = \psi/\eta \quad (3)$$

$$d\lambda/dx = R/u \quad (4)$$

$$(E + p + \frac{1}{2}\rho u^2 - \lambda Q)V = (E_0 + p_0 + \frac{1}{2}\rho_0 D^2)V_0 \quad (5)$$

这里 R 、 Q 与 E 为反应速率、单位体积释能量与内能。其它符号为

$$\psi = \sigma R - \delta, \quad \eta = 1 - u^2/c^2, \quad \delta = 2\omega_r$$

$$\rho^2 c^2 = [p + (\partial e/\partial V)_{p,\lambda}] / (\partial e/\partial p)_{v,\lambda}$$

$$\rho c^2 \sigma = (\partial p/\partial \lambda)_{e,v}, \quad V = 1/\rho$$

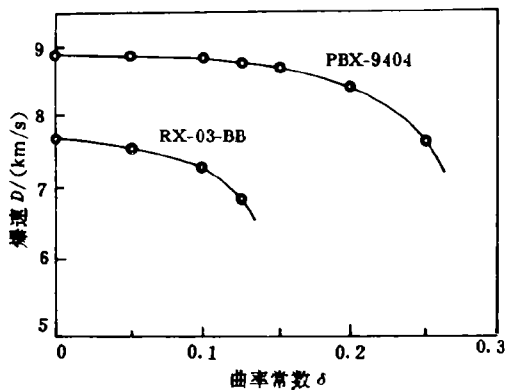


图 3 对 PBX-9404 与 RX-03-BB 两种炸药的爆速 D 与曲率常数 δ 之间的关系曲线

Fig. 3 Detonation velocity vs curvature for two kinds of explosives

其中: e 为单位质量内能, c 为冻结声速, δ 为与波阵面曲率有关的常数。由(3)式可见,在声速点有 $\eta=0$,此时需成立 $\psi=0$ 。可以证明含能材料 $\sigma>0$,因此当 $\delta=0$ 的平面爆轰时,波后声速点一定是 $R=0$ 的化学平衡点。而对散心爆轰有 $\delta>0$,在声速点 $R\neq 0$,可见此时化学反应尚未结束。对聚心爆轰 $\delta<0$,说明在整个反应区不应存在声速点。

对不同的 δ 值,可由 $\eta=\psi=0$ 的条件决定爆轰波的爆速。由于反应速率函数中包括除反应进程变量之外的其它物理量,状态方程亦相当复杂,因此需要应用数值计算“打靶法”寻找对应 δ 值的爆速,对定常方程组数值积分,判断积分轨道是否通

过声速点,并同时成立 $\psi=0$ 。

图 3 是敏感 PBX-9404 与钝感 RX-03-BB 两类炸药的计算结果。对不同的 δ 值,两条曲线的走向有较大差别。当爆速急剧减小,表示将达到不再成立定常解的曲率条件,即为熄火曲率。从计算结果可见,敏感炸药的熄火曲率,远大于钝感炸药,这与实验结果定性一致,但定量上有差距。另外在小曲率时成立线性关系,这也反映了实验结果。

3.3 散心爆轰波的临界冲击引爆压力

文献[3]的反应速率第一项表示点火、第二项表示增长,为讨论冲击引爆起始阶段的点火过程,近似地将反应速率仅取第一项、且用原参数。这样简化就可使用文献[7]的方法,对散心爆轰波的临界冲击引爆压力进行解析的估计。类似得到临界压力为

$$p_{cr} = [9/(8r_0\omega_1\rho_0^{3/2})]^{1/(n-3/2)} \quad (6)$$

其中:临界压力 p_{cr} ,初始起爆半径 r_0 ,初始密度 ρ_0 ,而 ω_1 与 n 为反应率参数。将有关数据代入(6)式后,得到的结果列于表 1。

表 1 两类炸药在不同半径处的临界冲击起爆压力值
Table 1 The critical pressure of shock initiation for two kinds of explosives at different radius

r_0/cm	0.1	0.5	1	2
p_{cr}/GPa				
PBX-03-9404	14.10	5.47	3.64	2.4?
RX-03-BB	25.0	18.0	16.0	14.5

由结果可见,钝感 RX-03-BB 炸药的临界冲击起爆压力,在所列四个半径处均远远高于敏感 PBX-9404 炸药的值。另外,从(6)式亦可知,炸药冲击引爆的难易程度主要决定于化学反应率,而与状态方程的关系不密切。

3.4 数值计算人为粘性系数与空间步长的匹配选取

大多数一维、二维爆轰数值模拟程序中,目前均采用人为粘性将波阵面的间断光滑化。人为粘性通常使用速度的二次项形式

$$q = \begin{cases} (l^2 \rho_0^2 / \rho^2) (\partial u / \partial x)^2, & \text{当 } \partial u / \partial x < 0 \\ 0, & \text{其它} \end{cases} \quad (7)$$

这里 $l=a\Delta x$, a 为人为粘性系数, Δx 为空间计算步长。对平面一维定态爆轰波,上述人为粘性的介入,使得原来 ZND 模型的结构改变为燃烧在压缩波内进行。从 V-N 点的状态沿瑞利线下降到 C-J 点的瑞利燃烧,改变成波前状态沿着带粘性瑞利线上升到 C-J 态的过程。带粘性的瑞利曲线弯曲程度与粘性形式和参数值有关,若参数与空间步长选取不当,将出现奇异的计算图象^[8]。

由定常波的三个守恒关系,考虑波后反应区的人为粘性,可有下面常微分方程

$$(d\phi/d\lambda)^2 = [p_0 - p + \rho_0 D^2(1 - \phi)]\phi / (l^2 \rho_0 R^2) \quad (8)$$

其中: $\phi=\rho_0/\rho$ 、 D 为爆速、 R 为反应速率。对方程数值积分,采用“打靶法”寻找与 $\lambda=1$ 直线相切的瑞利积分曲线。由此决定 $a\Delta x$ 的最佳匹配,这里 a 为人为粘性系数, Δx 为空间步长。对 PBX-9404,此值为 0.3cm 对 RX-03-BB 为 2.0cm。可见对定常爆轰波计算,两类炸

药空间步长的选取,对相同人为粘性数值,步长选取相差是较大的。

4 数值计算结果

利用一维 SIN 程序数值模拟不同厚度铜飞片,引爆 X-0290 与 X-0219 两种炸药,计算它们的速度阈值曲线。使用 HOM 状态方程和 Forest Fire 反应速率,由于速率参数是通过实验 POP 曲线得到的,因此数值模拟首先检验与此曲线的符合程度,在无其它错差情况下,它通常很好符合^[2]。图 4 为两种炸药的 POP 实验和计算情况的对比,其中实线为实验值。

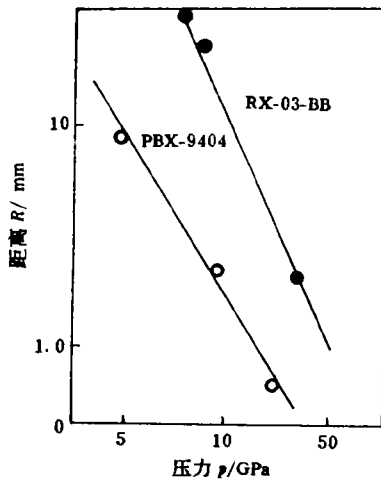


图 4 PBX-9404-与 RX-03-BB 炸药的实验 POP 曲线,其中点与圈为相应数值计算值

Fig. 4 POP experimental curves for PBX-9404 and RX-03-BB explosives. The dots and circles are the calculated points

飞片速度的引爆阈值计算,是对数值模拟精度的进一步检验。不同厚度铜飞片以不同速度冲击引爆炸药,它的入射冲击波强度 p_0 可预先估计,由 POP 图得到形成爆轰所通过的距离。但是它是否反映波后稀疏的影响,需要通过计算与实验进行对比。由图 5 的计算与实验对比,在一维平面情况,上述反应率计算冲击引爆过程基本与实验相符。但以下问题需要在模拟时注意。

(1) 在人为粘性系数确定之后,空间步长对定常爆轰计算有个适当的匹配关系。但对冲击引爆过程,此关系不再适合,通常的 $a \Delta x$ 要比定常时小得多。如对钝感的 X-0290 与 X-0219 炸药,若用定常态的匹配关系,能引起爆轰的速度条件也不再能引爆,更不能符合图 5 的实验曲线。这是因为在起爆阶段,入射冲击波强度峰值的计算依赖于空间步长的大小。

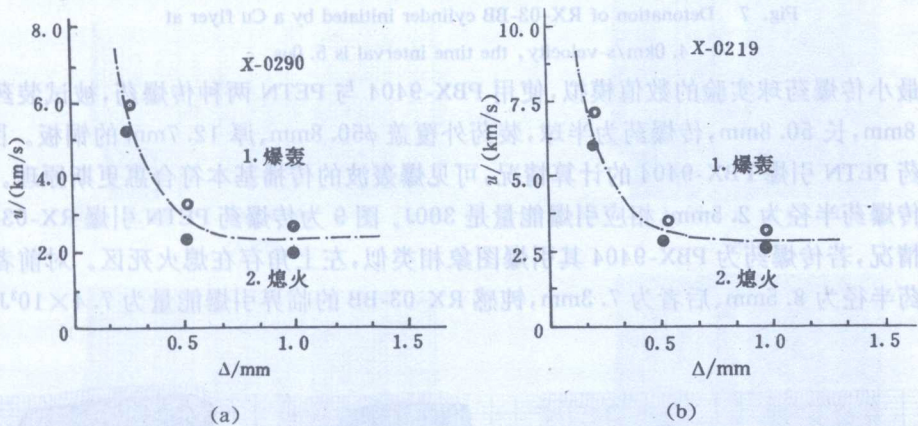
(2) 根据 ZND 模型的理论,平面一维稳定爆轰波结构内,存在达到化学平衡的声速点。但是在现有方法计算的爆轰波结构内,一般不存在这一点。这是由于结构宽度人为变宽、且要保持总能量守恒所致,亦是化学反应在高、低密度介质内进行引起的差别。若波后伴随稀疏波,爆轰结构内质点能反向加速而

达到声速,但此点的化学反应并未结束,类似于散心爆轰波的情形。因此伴随一定强度稀疏波的爆轰波亦能达到稳定状态,但爆速与爆压值均要略低于相应的 C-J 值。这也是数值模拟散心爆轰波时,也能部分反映非理想传播的原因。

二维计算使用双向拉氏的质团方法、Cochran 反应率与 JWL 状态方程。首先考察直径 11.0mm,厚 1.0mm 的铜片,以不同速度冲击引爆直径为 30.0mm RX-03-BB 炸药柱的情况。

图 6 为数值模拟的结果,飞片速度在 3.0km/s 以下时,冲击不能发展成稳定爆轰波,它仅能在药柱中爆出一个空洞。当飞片速度大于或等于 4.0km/s 时,药柱内形成稳定爆轰波,但在药柱左上角存在一定范围的熄火死区、见图示。计算表明,熄火区所占炸药的比

例,随冲击速度的增加而下降。且在钝感炸药内,爆轰波的传播不再遵循理想的惠更斯原理,反映了明显的非理想性质。RX-03-BB 药柱外复盖 2.0mm 铜壳层,φ10mm×1mm 铜飞片以 4.0km/s 速度对其进行冲击引爆,计算爆轰波的发展过程,见图 7 所示。由计算可以初步判断,对 φ11mm×1mm 铜飞片冲击引爆 φ30mm 的 RX-03-BB 炸药柱,它的临界速度为 4.0km/s,而实验值为 4.2km/s。



1. Detonation; 2. Fails
 图 5 不同厚度铜飞片冲击引爆炸药的阈值速度,圈与点为计算值
 Fig. 5 Threshold flyer velocity vs flyer thickness,
 The dots and circles are the calculated points

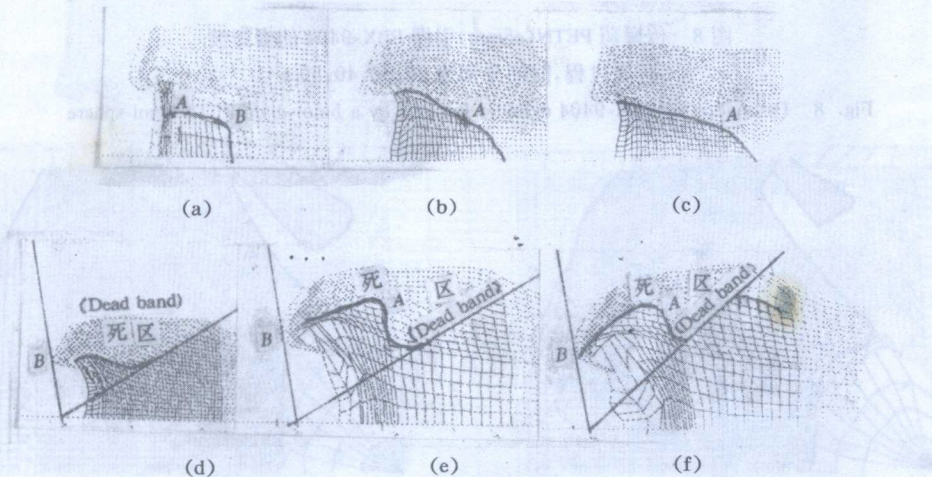


图 6 φ11mm×1mm 铜飞片,以不同速度冲击引爆 φ30mm RX-03-BB 炸药柱的爆轰情况,
 (a) 飞片速度 2.0km/s, (b) 速度 2.5km/s, (c) 速度 3.0km/s, (d) 速度 4.0km/s,
 (e) 速度 5.5km/s (f) 速度 6.5 km/s

Fig. 6 Detonation of RX-03-BB cylinder (φ30mm) initiated by a
 Cu flyer (φ11mm×1mm) at (a) velocity 2.0km/s, (b) 2.5km/s,
 (c) 3.0km/s, (d) 4.0km/s, (e) 5.5km/s, (f) 6.5km/s

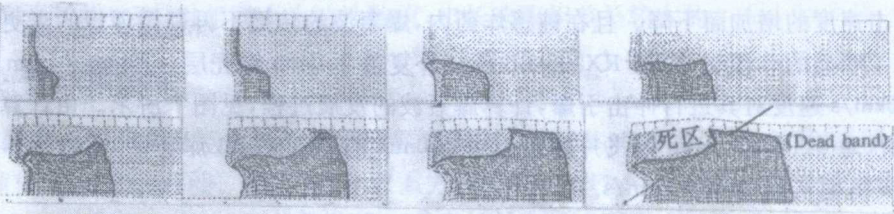


图7 与图6相同条件,飞片速度4.0km/s的引爆过程,每图隔5.0 μ s的情况

Fig. 7 Detonation of RX-03-BB cylinder initiated by a Cu flyer at

4.0km/s-velocity, the time interval is 5.0 μ s

对最小传爆药球实验的数值模拟,使用PBX-9404与PETN两种传爆药,被试装药尺寸 ϕ 50.8mm,长50.8mm,传爆药为半球,装药外覆盖 ϕ 50.8mm、厚12.7mm的铜板。图8为传爆药PETN引爆PBX-9404的计算情况,可见爆轰波的传播基本符合惠更斯原理。它的临界传爆药半径为2.5mm,相应引爆能量是300J。图9为传爆药PETN引爆RX-03-BB的计算情况,若传爆药为PBX-9404其引爆图象相类似,左上角存在熄火死区。对前者临界传爆药半径为8.5mm、后者为7.3mm,钝感RX-03-BB的临界引爆能量为 7.4×10^3 J。

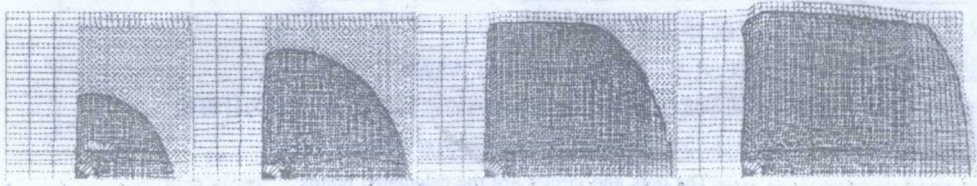


图8 传爆药PETN(ϕ 5mm)引爆PBX-9404的爆轰波

传爆过程,时间分别为20、30、40、50 μ s

Fig. 8 Detonation of PBX-9404 cylinder initiated by a 5mm-diam PETN semi-sphere

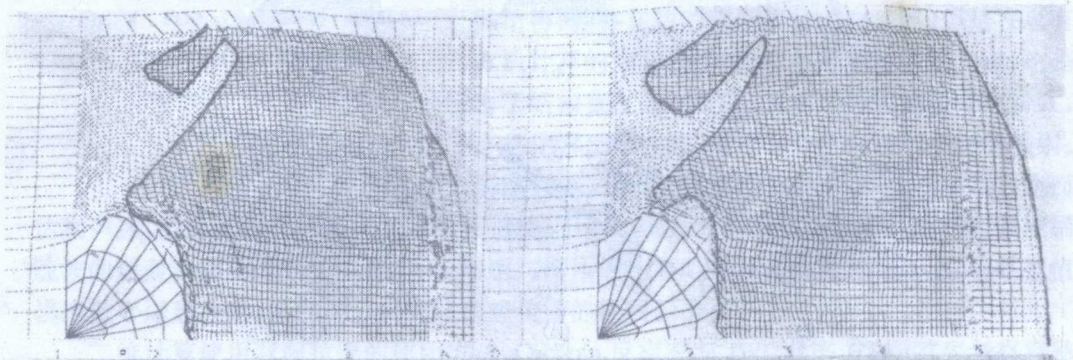


图9 传爆药PETN引爆RX-03-BB的计算情况,左传爆药 ϕ 15mm右为 ϕ 17mm

Fig. 9 Detonation of RX-03-BB cylinder initiated by a

15mm-diam(left) and a 17mm-diam(right) PETN semi-sphere

5 存在的问题

采用唯象化学反应速率及相应状态方程,进行爆轰特性的估计和数值模拟,能够得到

关于稳定态爆速、爆压和结构方面的信息,也能得到冲击引爆过程主要特征量与图象的计算结果。从上节可见,数值模拟亦能复制钝感炸药的主要特征与图象。但它存在以下问题:

(1)对人为粘性系数与空间步长选取的依赖,使计算结果带有一定的人为性。如前所述,稳态爆轰计算时,对不同炸药使用的反应速率与状态方程,存在较佳的 $a\Delta x$ 匹配。实际上,选取小于此值的计算结果也是正确的,只是结构内的压力峰不再是 C-J 状态点。在非定常冲击引爆过程的计算中, $a\Delta x$ 值的选取要比定态估计值小得多。例如,对 RX-03-BB

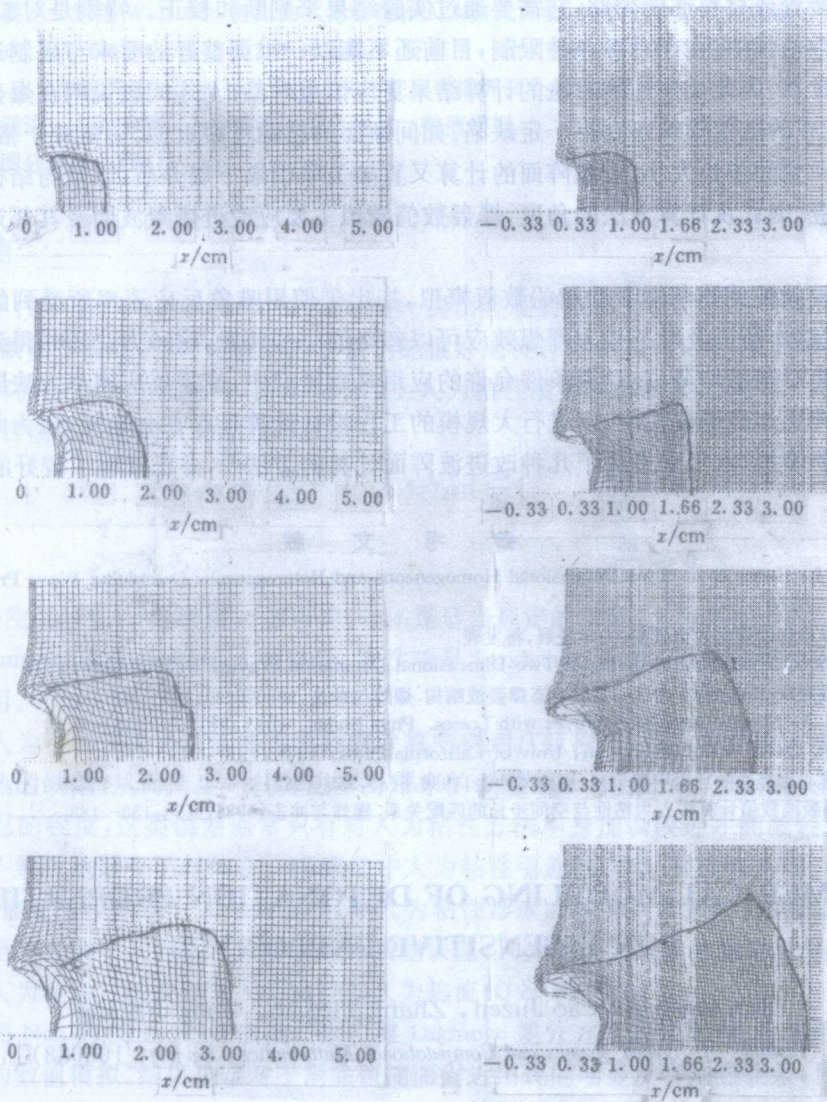


图 10 不同 $a\Delta x$ 值(左 0.272,右 0.136)时,铜飞片(速度 5.5km/s)冲击引爆 RX-03-BB 的计算结果,从上而下的时间为 1、2、3、4 μ s。

Fig. 10 The calculated results of RX-03-BB explosive cylinder initiated by a Cu flyer at 5.5km/s-velocity using two values of $a\Delta x$ (left 0.272,right 0.136), the time interval is 1,2,3,4 μ s

即使取敏感炸药的 0.3, 上节图 7 将不再能出现稳态爆轰。对铜飞片速度为 5.5 km/s, 若取 $a\Delta x = 0.6$ 得到不能引爆的计算结果。但是引爆过程的计算, 也并非它的值取得愈小愈精确。图 10 为不同 $a\Delta x$ 值的计算图象, 从这里可见两者定量与定性上均存在一定差别。故计算结果需要实验校正, 不能仅靠数值计算的精度进行分析。

(2) 数值模拟需要实验的图象与结果进行校正, 使计算的推广应用受到一定的限制。本文的计算表明, 对某种炸药与爆轰装置能够得到符合实验的数值模拟结果, 这并不能说明对其它装置或材料亦能如此, 它需要通过实验结果来判断和校正。特别是对二维、三维装置进行数值模拟, 由于计算条件限制, 目前还不能以一维调整好的要求与限制进行大量工程设计计算, 因此反应速率方法的计算结果更应慎重对待。上述问题说明在爆轰波波阵面附近, 现在的数值模拟还存在一定缺陷。如间断面的粘性过渡近似, 它依赖于格式精度、粘性系数和空间步长大小。而波阵面的计算又直接关联引爆下层介质, 以及与结构有关的非理想效应。因此从计算方法的角度, 爆轰数值模拟主要应改进爆轰波面及其邻近区域的计算。

本文仅就钝感炸药爆轰性能的数值模拟, 指出了使用唯象反应速率所受到的一些限制。但对敏感炸药以及对某些非理想效应可以忽略的一些装置, 这种方法还是得到了广泛应用。即使对钝感炸药, 在计算条件允许的应用基础研究中, 使用反应速率方法同样可以反映部分钝感炸药爆轰性能, 但进行大规模的工程设计计算还存在一定困难。为此对钝感炸药的数值模拟, 近年来发展了几种改进波阵面计算的方法^[2], 并已取得了较好的结果。

参 考 文 献

- 1 Mader C L, Forest C A. Two-Dimensional Homogeneous and Heterogeneous Detonation Wave Propagation, LA-6259, 1976
- 2 孙锦山. 非理想爆轰的数值模拟. 力学进展, 将发表.
- 3 Cochran S G. Numerical Modeling of Two-Dimensional Detonation Waves. UCID-18024, 1979
- 4 曹菊珍, 戴照双. PBX-9404 与 TATB 的定态爆轰波结构. 爆炸与冲击, 1986, 6(4): 320~332
- 5 Huerta M A. Steady Detonation Waves with Losses. Phys Fluids, 1985, 28(9): 2735~2744
- 6 Fickett W, Davis W C. Detonation, Univ of California Press, 1979, 199~211
- 7 曹菊珍. 散心爆轰波的冲击引爆判据. 爆炸与冲击, 1986, 6(4): 350~362
- 8 曹菊珍. 爆轰波数值计算中人为粘性与空间步长的匹配关系. 爆炸与冲击, 1986, 6(2): 135~148

NUMERICAL MODELING OF DETONATION PROPERTIES FOR INSENSITIVE EXPLOSIVES

Sun Jinshan, Cao Juzen, Zhang Tieqiao, Gong Jinfang

(Institute of Applied physics and Computational Mathematics, Beijing, 100088)

ABSTRACT The detonation properties of the insensitive explosive TATB are studied by means of numerical modeling with reaction rate and its EOS in this paper. The calculating results show that, this kind of modeling method can duplicate part of its properties for insensitive explosives although the detonation structure and its non-ideal effects can not be described. The restrictions on detonation numerical modeling are also discussed in the paper.

KEY WORDS detonation theory, insensitive explosives, numerical modeling