

高能炸药爆轰波反应区流场的 拉格朗日分析方法^{*}

张振宇^a 浣 石^a 卢芳云^a 刘吉平^b

(a 国防科技大学应用物理系 长沙 410073)

(b 南京空军航弹研究所 南京 210000)

摘要 给出了一种简单的、对高能炸药爆轰反应区流场进行拉格朗日分析的方法。若已知未反应炸药和反应产物的状态方程,采用适当假设,我们可以在不知道反应速率函数的情况下得到爆轰反应区中的关系 $p(\lambda)$ 和 $u(\lambda)$ 等。根据这些关系及爆轰反应区中拉氏量计的实验结果 $p(t)$ [或 $u(t)$] 通过插值或数据拟合可以得到爆轰反应区中的反应流场。我们将此方法应用于 PBX-9404 炸药,并得到其爆轰反应区中的反应流场。

关键词 爆轰波反应区 拉格朗日分析

中图法分类号 TQ 564 O 241.8

1 引 言

多年来,高能炸药爆轰波反应区结构一直是爆轰学领域中的重要课题之一。人们发展了许多实验方法以期得到 CJ 爆轰压力、爆轰反应区宽度、Von-Neumann 尖峰压力和爆轰反应区中的其它参数分布。但迄今为止,对高能炸药爆轰波反应区流场的研究仍存在许多问题。利用通常的反应流拉格朗日分析(RFLA)^[1],只能给出炸药起爆过程中,埋入炸药的少数几个拉格朗日量计之间的反应流场,而得不到定常爆轰波反应区流场的细节。

在本文中,我们给出了一种简单的、对高能炸药定常爆轰波反应区流场进行分析的方法。并对 PBX-9404 炸药的爆轰波反应区流场进行了分析和讨论。该方法的基础由 Y. Partom 在文献 [2] 中给出。

2 爆轰波反应区流场的拉格朗日分析方法

2.1 反应方程

假设在爆轰反应区中反应物和产物的压力平衡,炸药及产物的 $\bar{w}L$ 状态方程为

$$p = A_s \left(1 - \frac{w_s}{R_1 \bar{V}_s}\right) \exp(-R_1 \bar{V}_s) + B_s \left(1 - \frac{w_s}{R_2 \bar{V}_s}\right) \exp(-R_2 \bar{V}_s) + \frac{w_s E_s}{V_0 \bar{V}_s} \quad (1)$$

$$p = A_g \left(1 - \frac{w_g}{r_1 \bar{V}_g}\right) \exp(-r_1 \bar{V}_g) + B_g \left(1 - \frac{w_g}{r_2 \bar{V}_g}\right) \exp(-r_2 \bar{V}_g) + \frac{w_g E_g}{V_0 \bar{V}_g} \quad (2)$$

* 1994 年 10 月 11 日收到原稿,1995 年 7 月 15 日收到修改稿。

式中: $\bar{V} = V/V_0$ 为相对比容 E 为比内能; w 为 Gurney 系数。下标 s 和 g 分别表示反应固体和产物气体参量。混和物的比内能和比容满足混和法则

$$E = \lambda E_g + (1 - \lambda)E_s \quad (3)$$

$$V = \lambda V_g + (1 - \lambda)V_s \quad (4)$$

其中 λ 为反应进程变量, $0 \leq \lambda \leq 1$

如果, 在爆轰波反应区中的炸药分解反应机制是体积反应, 认为在炸药或其颗粒内部反应物固体和产物气体密不可分, 则热平衡假设成立。即

$$T = T_s = T_g \quad (5)$$

混和物中每一组份的能量平衡方程为

$$E_s + p\dot{V}_s = -\frac{q}{1 - \lambda} \quad (6)$$

$$E_g + p\dot{V}_g = \frac{q}{\lambda} + \frac{1}{\lambda} [Q + E_s - E_g + p(V_s - V_g)] \dot{\lambda} \quad (7)$$

式中: q 为每单位混和物质量由热传导引起的热流速率; Q 为反应热。

如果, 在爆轰波反应区中的炸药分解反应机制是表面燃烧反应, 即反应是由成核的热点通过表面燃烧形式向热点外传播, 此移动的燃烧表面将高温产物与低温固体反应物分开, 在两种组份之间来不及进行热交换。这时它们的温度是不相等的, 混和物通过热传导引起的热流速率为零, 每一组份的能量平衡方程为

$$E_s + p\dot{V}_s = 0 \quad (8)$$

$$E_g + p\dot{V}_g = \frac{1}{\lambda} [Q + E_s - E_g + p(V_s - V_g)] \dot{\lambda} \quad (9)$$

根据所有上述假设及能量平衡方程, 可以得到如下反应方程

$$\dot{V}_g = D_{Vg} \dot{p} + E_{Vg} \dot{\lambda} \quad (10)$$

$$\dot{V}_s = D_{Vs} \dot{p} + E_{Vs} \dot{\lambda} \quad (11)$$

$$\dot{V} = D_V \dot{p} + E_V \dot{\lambda} \quad (12)$$

式中:

$$D_V = \lambda D_{Vg} + (1 - \lambda) D_{Vs} \quad ; \quad (13)$$

$$E_V = \lambda E_{Vg} + (1 - \lambda) E_{Vs} \quad (14)$$

系数 D_{Vg} , E_{Vg} 和 D_{Vs} , E_{Vs} 分别与产物和反应物状态方程有关

对燃烧体积反应, 在热平衡假设下, 上述系数的表达式为

$$D_{Vg} = \frac{1}{\Delta} [B_{Eg} \frac{\partial E_s}{\partial p} - (B_{Es} - \frac{\partial E_s}{\partial V_s}) \frac{\partial E_g}{\partial p}] \quad (15)$$

$$E_{Vg} = \frac{1}{\Delta} [C_{Eg} (B_{Es} - \frac{\partial E_s}{\partial V_s}) - C_E B_{Eg}] \quad (16)$$

$$D_{Vs} = \frac{1}{\Delta} [A_{Es} \frac{\partial E_g}{\partial p} - \frac{\partial E_s}{\partial p} (A_{Eg} - \frac{\partial E_g}{\partial V_g})] \quad (17)$$

$$E_{Vs} = \frac{1}{\Delta} [C_{Es} (A_{Eg} - \frac{\partial E_g}{\partial V_g}) - C_{Eg} A_{Es}] \quad (18)$$

$$\Delta = A_{E_s} B_{E_g} - (B_{E_s} - \frac{\partial E_s}{\partial V_s})(A_{E_g} - \frac{\partial E_g}{\partial V_g}) \quad (19)$$

其中:

$$A_{E_g} = \frac{W_g}{V_g} T c_{v_g} c_{v_s} (1 - \lambda) D_q - p; \quad (20)$$

$$B_{E_g} = - \frac{W_g}{V_s} T c_{v_g} c_{v_s} (1 - \lambda) D_\phi; \quad (21)$$

$$C_{E_g} = c_{v_g} [Q + E_s - E_g + p(V_s - V_g)] D_\phi; \quad (22)$$

$$A_{E_s} = \frac{W_g}{V_g} T c_{v_g} c_{v_s} \lambda D_\phi; \quad (23)$$

$$B_{E_s} = \frac{W_g}{V_s} (T c_{v_g} c_{v_s} \lambda D_q) - p; \quad (24)$$

$$C_{E_s} = c_{v_s} [Q + E_s - E_g + p(V_s - V_g)] D_\phi; \quad (25)$$

$$D_g = \lambda c_{v_g} (1 - \lambda) c_{v_s} \quad . \quad (26)$$

式中 c_v 为定容比热, 温度 T 由如下方程给出

$$T = D_T p + E_T \lambda \quad (27)$$

其中:

$$D_T = A_T D_{V_g} + B_T D_{V_s}; \quad (28)$$

$$E_T = A_T E_{V_g} + B_T E_{V_s} + C_T; \quad (29)$$

$$A_T = - \frac{W_g}{V_g} T c_{v_g} \lambda D_\phi; \quad (30)$$

$$B_T = - \frac{W_g}{V_s} T c_{v_s} (1 - \lambda) D_\phi; \quad (31)$$

$$C_T = [Q + E_s - E_g + p(V_s - V_g)] D_q \quad (32)$$

对表面燃烧反应, 方程 (10)~ (12) 中的系数为

$$D_{V_g} = - \frac{\partial E_g}{\partial p} / (p + \frac{\partial E_g}{\partial V_g}) \quad (33)$$

$$E_{V_g} = \frac{1}{\lambda} [Q + E_s - E_g + p(V_s - V_g)] / (p + \frac{\partial E_g}{\partial V_g}) \quad (34)$$

$$D_{V_s} = - \frac{\partial E_s}{\partial p} / (p + \frac{\partial E_s}{\partial V_s}) \quad (35)$$

$$E_{V_s} = 0 \quad (36)$$

2.2 流场分析

描述一维定常爆轰波的拉格朗日运动方程为

$$\dot{V} + \frac{V_0}{D} u = 0 \quad (37)$$

$$\dot{u} - \frac{V_0}{D} p = 0 \quad (38)$$

式中 D 为定常爆轰波速度。消去上式中的 \dot{u} 得

$$\dot{V} + \frac{V_0^2}{D^2} p = 0 \quad (39)$$

利用 (39) 式及反应方程 (10)、(11)、(12) 和 (27), 可得如下解反应区中 $p(\lambda)$ 关系的常微分方程组

$$\frac{dp}{d\lambda} = - \frac{E_v}{D_v + (V_0^2 D^2)} = K_p \quad (40)$$

$$\frac{dV_s}{d\lambda} = D_{V_s} K_p + E_{V_s} \quad (41)$$

$$\frac{dV_g}{d\lambda} = D_{V_g} K_p + E_{V_g} \quad (42)$$

$$\frac{dT}{d\lambda} = D_T K_p + E_T \quad (43)$$

其中方程 (43) 只对热平衡假设成立。在表面燃烧反应机制假设下, 只需联立求解前三个方程。

由此得到的反应区中 $p(\lambda)$ 关系与反应速率方程的具体形式无关。将 $p(\lambda)$ 关系代入方程 (38) 和 (39) 中并积分, 又可得到反应区中 $u(\lambda)$ 和 $V(\lambda)$ 关系。

在求出 $p(\lambda)$ 、 $u(\lambda)$ 和 $V(\lambda)$ 关系之后, 只要根据实验测出反应区中 p 、 u 、 V 三个参量中的任意一个参量随时间变化曲线, 用插值或数据拟合方法就可得到 $p(t)$ 、 $u(t)$ 、 $V(t)$ 、 $\lambda(t)$ 和 $\dot{\lambda}(t)$ 等参量的流场分布以及它们之间的相互关系。

对常微分方程组 (40)~(42) 以及在热平衡假设成立时的方程 (43) 积分, 从 VN 点开始, 到 CJ 点结束。首先必须给出 VN 点上的初值 p_{VN} 、 V_{sVN} 、 V_{gVN} 和 T_{VN} 。

根据 ZND 模型的假设, 在 VN 点处无化学反应发生, p 和 V_s 的初值与体积反应或者表面燃烧反应无关, 它们可根据炸药的 JW L 状态方程和 Hugoniot 关系联立求出。即

$$p = A_s \left(1 - \frac{w_s}{R_1 \bar{V}_s}\right) \exp(-R_1 \bar{V}_s) + B_s \left(1 - \frac{w_s}{R_2 \bar{V}_s}\right) \exp(-R_2 \bar{V}_s) + \frac{w_s E_s}{V_0 \bar{V}_s}$$

$$E_s = \frac{1}{2} p V_0 (1 - \bar{V}_s)$$

在体积反应假设条件下, 求解 T_{VN} 可利用如下 HOM 状态方程

$$\ln T_{VN} = C_0 + \sum_{i=1}^4 C_i (\ln V_s)^i$$

取产物 JW L 状态方程的另一形式

$$p = A_g \exp(-r_1 \bar{V}_g) + B_g \exp(-r_2 \bar{V}_g) + C_{V_g} w_g T \bar{V}_g$$

将 p_{VN} 和 T_{VN} 代入可求出 V_{gVN} , 这里用到了压力平衡和热平衡假设。

在表面燃烧反应假设下, 因为在 VN 点 $\lambda = 0$ 、 $\dot{\lambda} = 0$ 根据能量平衡方程 (9) 有

$$Q + E_s - E_g + p(V_s - V_g) = 0$$

将炸药和产物的状态方程及 p_{VN} 、 V_{sVN} 代入, 即可求出 V_{gVN} 。

3 对 PBX-9404 炸药的应用

3.1 $p(\lambda)$ 、 $u(\lambda)$ 曲线

将 PBX-9404 炸药的参数代入常微分方程 (40)~(42) 和 (43) 中, 求出的爆轰波反应区中 $p(\lambda)$ 、 $u(\lambda)$ 关系曲线如图 1 所示。由图看出, 在体积反应假设下, 压力 p 和粒子速度 u 在爆轰波阵面之后有一个幅值上升区。此现象与热平衡假设有关, 初始时炸药中未反应固体在 VN 点附近温度较低, 导致产物气体温度较低, 密度较大, 反应区中混和物不发生热膨胀效应。随着反应的进行, 混和物温度、压力不断升高, 当混和物中产物气体所占比重达到某一程度之后, 混和物开始发生热膨胀效应, 使混和物的状态迅速下降至 CJ 点处。这

就是说, 在爆轰波反应区中如果发生的是体积反应, 炸药的初始分解过程是未反应固体不断吸收产物气体热量的过程, 即炸药混和物的反应在宏观上体现的是一个吸热反应。在一定延迟时间之后, 才开始放热反应。因此我们可以根据爆轰波反应区中的实验 $p(t)$ 曲线或实验 $u(t)$ 曲线的形状, 来判断炸药分解反应的机制。

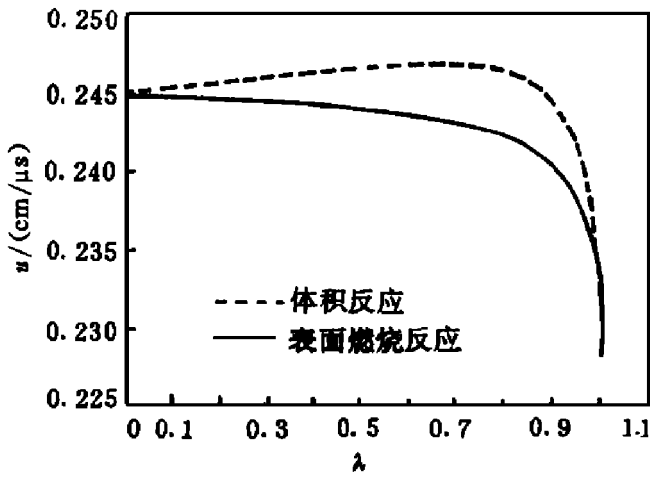


图 1(a) 定常爆轰波反应区中 $u(\lambda)$ 关系

Fig 1(a) $u(\lambda)$ across the reaction zone for steady detonation

—Bulk reaction; - Surface burning reaction

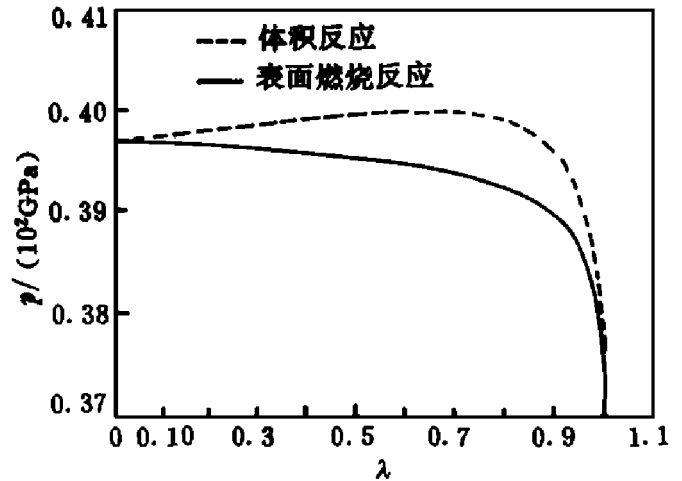


图 1(b) 定常爆轰波反应区中 $p(\lambda)$ 关系

Fig 1(b) $p(\lambda)$ across the reaction zone for steady detonation

—Bulk reaction; - Surface burning reaction

3.2 实验 $u(t)$ 曲线

按照 Hayes^[3] 的实验结果, PBX-9404 炸药的化学反应区宽度小于 50ns, 它的 VN 点最大压力和粒子速度分别为 39.81GPa 和 0.245cm/μs, 相应的 CJ 值为 37.0GPa 和 0.229cm/μs, 与图 1 中的计算结果非常一致 (这与炸药的未反应物及产物的状态方程有关)。在 VN 点与 CJ 点之间粒子速度基本上呈线性下降趋势。没有观察到 VN 点之后有粒子速度的上升区。因此, 可以认为 PBX-9404 炸药的爆轰反应是表面燃烧反应。图 2 给出了理想化的爆轰波反应区中实验 $u(t)$ 曲线。

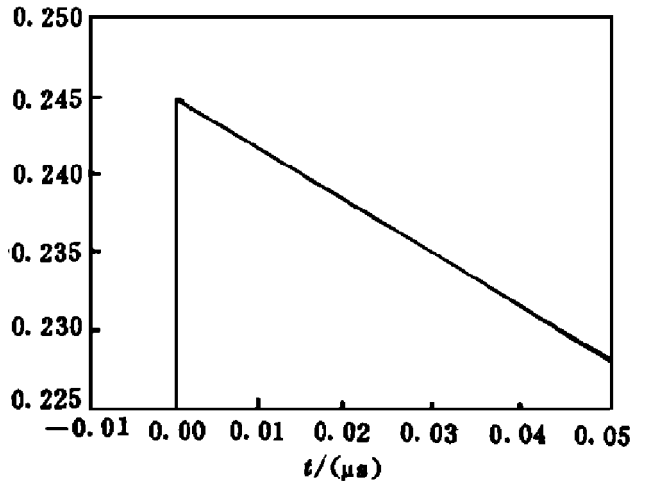


图 2 定常爆轰波反应区中理想的 $u(t)$ 关系

Fig 2 $u(t)$ across the reaction zone for steady detonation

3.3 拉格朗日分析结果

图 3 和图 4 给出了在表面燃烧反应假设下, 由上述爆轰波反应区拉格朗日分析方法得出的结果。由图 3 可见, 对应于图 2 所示的爆轰波反应区中的粒子速度分布, 在爆轰反应区中炸药分解反应大致可分为两个阶段: 第一个阶段是在约 10ns 之前的快速反应阶段; 第二个阶段是在约 10ns 之后较为缓慢的化学反应阶段。有 80% 左右的炸药在第一阶段中完成分解。我们对 Forest-Fire 反应速率模型^[4]和 Johnson 等人^[5]提出的经验热点模

型也做了相应的分析,结果如图 5和图 6所示。按照 Forest-Fire反应速率模型,在定常爆轰压力下,反应区宽度非常窄,约 5ns左右;而按照经验热点模型,虽然初始反应速率较低,但由于反应速率下降缓慢,因此,平均反应速率较大,反应区宽度也明显小于 50ns

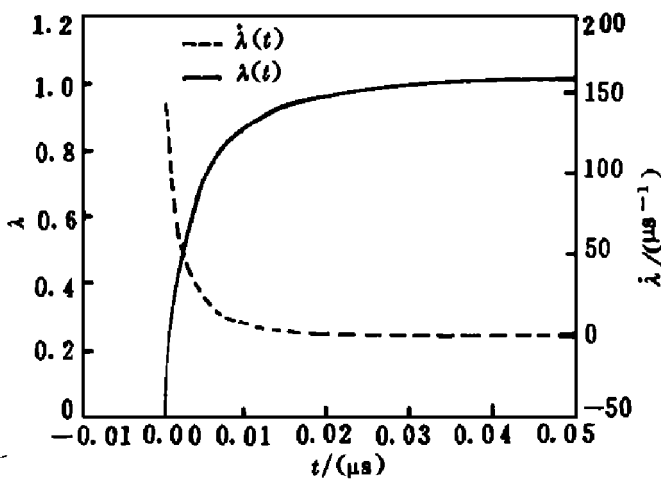


图 3 定常爆轰波反应区中 $\lambda(t)$ 和 $\dot{\lambda}(t)$ 关系
Fig. 3 $\lambda(t)$ and $\dot{\lambda}(t)$ across the reaction zone for steady detonation

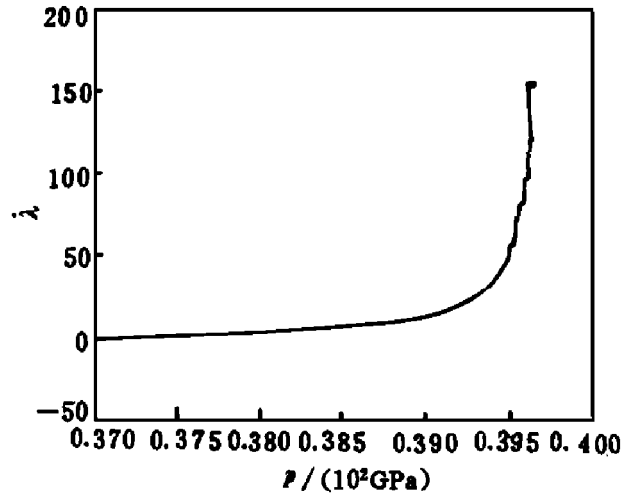


图 4 定常爆轰波反应区中 $\dot{\lambda}(p)$ 关系
Fig. 4 $\dot{\lambda}(p)$ across the reaction zone for steady detonation

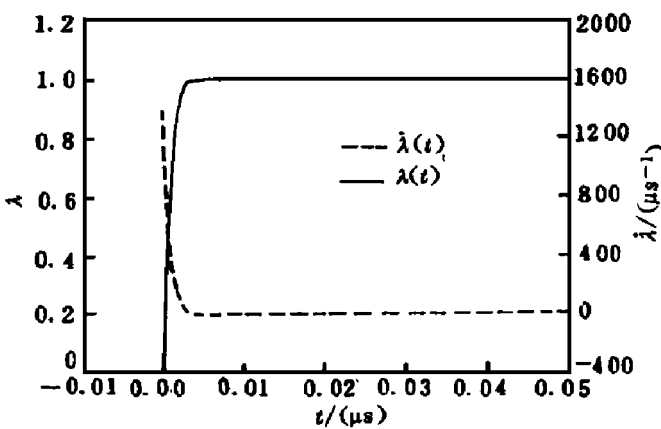


图 5 按照 Forest-Fire反应速率得到的定常爆轰波反应区中 $\lambda(t)$ 和 $\dot{\lambda}(t)$ 关系
Fig. 5 $\lambda(t)$ and $\dot{\lambda}(t)$ across the reaction zone for steady detonation according to Forest-Fire reaction rate

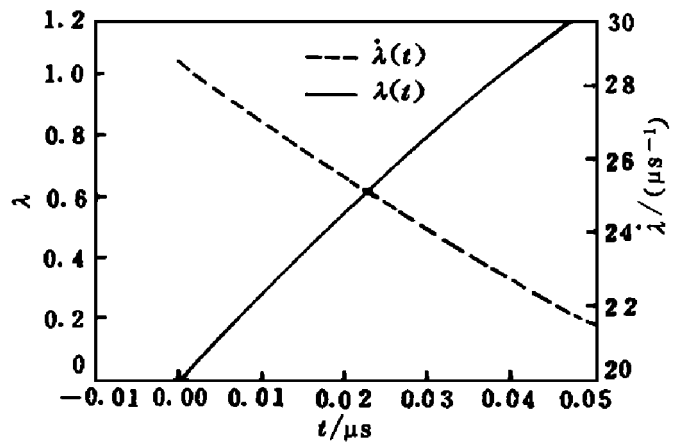


图 6 按照经验热点模型得到的定常爆轰波反应区中 $\lambda(t)$ 和 $\dot{\lambda}(t)$ 关系
Fig. 6 $\lambda(t)$ and $\dot{\lambda}(t)$ across the reaction zone for steady detonation according to empirical hot-spot model

在图 4中,给出了爆轰反应区 $\dot{\lambda}(p)$ 的关系曲线,由此,我们可以对所有只与压力有关的反应速率模型,在定常爆轰极限条件下进行高压范围的标定。

在本文计算中所用到的关于 PBX-9404炸药参数基本上取自文献 [6]

作者给出的炸药爆轰反应区流场拉格朗日分析方法的基础是准确的炸药及产物状态方程和爆轰波反应区中实验 $u(t)$ 曲线或 $p(t)$ 曲线。

参 考 文 献

- 1 Vantine H C, Rainsberger R B, Curtis W D, Lee R S, Cowperthwaite M, Rosenberg J T. The Accuracy of Reaction Rates Inferred from Lagrange Analysis and In-Situ Gauge Measurements. In: 7th Symposium (International) on Detonation. 1982. 466
- 2 Parton Y. Characteristics Code for Shock Initiation. LA-10773. 1986
- 3 Hayes B, Tarver C M. Interpolation of Detonation Parameters from Experimental Particle Velocity Records. In: 7th Symposium (International) on Detonation. 1982. 799
- 4 Mader C L. Numerical Modeling of Detonation. Berkeley, California University of California Press. 1979
- 5 Johnson J N, Tang P K, Forest C A. Shock Wave Initiation of Heterogeneous Reactive Solids. Journal of Applied Physics. 1985. 57(9): 4323
- 6 章冠人, 阵大年. 凝聚炸药起爆动力学. 北京: 国防工业出版社, 1991. 130~139

LAGRANGIAN ANALYSIS OF FLOW FIELD IN DETONATION REACTION ZONE OF HIGH EXPLOSIVES

Zhang Zhenyu, Huan Shijun, Lu Fangyun

(National University of Defense Technology, Changsha, 410073)

Liu Jiping

(Institute of Aviation Bomb, Nanjing, 210000)

ABSTRACT A simple Lagrangian analysis method to give the reaction flow field in detonation reaction zone of high explosives is proposed in this paper. With knowing the equations of state of the unreacted explosive and the reaction products, as well as with some appropriate assumptions, we could obtain the relationship of $p(\lambda)$ and $u(\lambda)$, etc across the detonation reaction zone without specifying the reaction rate function (where p is the pressure, u is the particle velocity, λ is the reaction progress variable). According to these relations and the experimental results about $p(\lambda)$ (or $u(\lambda)$) across the detonation reaction zone, the reaction flow field across the detonation reaction zone could be obtained by means of interpolation or data fit. We used the method mentioned above to get the reaction flow field across the reaction zone of PBX-9404.

KEY WORDS detonation reaction zone, Lagrangian analysis