

文章编号: 1006-9941(2006)04-0294-03

钝感炸药爆轰过程中人为粘性与空间步长的匹配关系

黄勇, 潘昊, 胡晓棉

(北京应用物理与计算数学研究所计算物理国家重点实验室, 北京 100088)

摘要: 在数值计算平面爆轰波中, 当爆轰波达到稳定状态时, 数值计算结果要符合 Chapman-Jouguet 理论。本文采用修正的 JWL 产物状态方程和 Hybrid 反应率, 导出了钝感炸药 PBX9502 的人为粘性系数与空间步长的匹配关系。符合此条件时, 爆轰波速度及声速点的状态——压力、密度及内能等符合 C-J 条件, 几乎不受空间步长的影响, 这样便可以使网格宽度加宽, 利于在实际工程中应用。

关键词: 爆炸力学; 钝感炸药; 人为粘性; 定向步长
中图分类号: O389; TJ55

文献标识码: A

1 引言

钝感炸药爆轰过程的数值模拟需要考虑化学反应的影响, 当采用化学反应率计算爆轰过程时, 所需的网格较密, 例如当采用 Hybrid 反应率^[1]计算时, 一般需要每厘米 500 个网格以上。在计算过程中发现, 当网格较粗时, 人为粘性对于计算结果影响很大, 采用不同的人为粘性形式及大小, 可以在较粗的网格条件下 (每厘米 200 个网格) 取得与实验结果相近的计算结果。尽管如此, 每厘米 200 个网格对于具体的工程设计仍是很难以达到的。需要进一步研究人为粘性和空间步长的匹配关系, 以满足当爆轰波达到稳定状态时, 其声速点的波后流场与 C-J 理论一致。

本文采用 Hybrid 反应率和修正的 JWL 产物状态方程^[2], 从定常平面一维爆轰波方程出发, 导出了人为粘性系数与空间步长的匹配关系, 当符合这一关系时, 计算得到的爆轰波速度及声速点的状态——压力、密度及内能等符合 C-J 条件。

2 人为粘性与空间步长匹配关系

定常平面一维爆轰波满足质量、动量、能量方程为

$$\rho u = \rho_0 u_0 \quad (1)$$

$$\rho + q + \rho u^2 = p_0 + \rho_0 u_0^2 \quad (2)$$

$$e + p + q + \frac{u^2}{2} = p_0 v_0 + e_0 + \frac{u_0^2}{2} \quad (3)$$

其中, ρ, u, p, e, v, q 分别表示密度、速度、压力、单位质量内能、比体积及人为粘性压力。下标“0”表示波前。

由式(1)、(2)和(3)可得:

$$q = -p + p_0 + \rho_0 u_0^2 \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right) \quad (4)$$

$$e = e_0 + \frac{u_0^2}{2} \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right)^2 + p_0 (v_0 - v) \quad (5)$$

人为粘性可以表示为:

$$q = \begin{cases} 0 & (\partial u / \partial x) \geq 0 \\ (l^2 v / v_0^2) (\partial u / \partial x)^2 & (\partial u / \partial x) < 0 \end{cases} \quad (6)$$

其中 l 满足

$$l = a \Delta x / \phi \quad (7)$$

a 是人为给定的人为粘性常数, Δx 为计算网格尺寸, ϕ 为密度比, 即 $\phi = \rho_0 / \rho$, ρ_0 为波前密度, ρ 为波后密度。引入 λ 为炸药的反应分数, 则化学反应率 R 有

$$R = \frac{d\lambda}{dt} \quad (8)$$

经过推导^[3], 可以得到

$$\frac{d\phi}{d\lambda} = -\frac{1}{R} \sqrt{v_0 \phi^3 [p - p_0 + \rho_0 u_0^2 (1 - \phi)] / a^2 \Delta x^2} \quad (9)$$

对于 Hybrid 反应率^[1], 其反应方程的具体形式为:

$$\frac{d\lambda_h}{dt} = R_1 = \frac{1}{\tau_h} (1 - \lambda_h) \quad (10)$$

$$\frac{dE_b}{dt} = R_2 = (1 - E_b) \left[\frac{\eta}{\tau_e} \frac{(\lambda_h - f_0 / \eta)}{(1 - f_0 / \eta)} + \frac{1}{\tau_H} \right] \quad (11)$$

$$\frac{d\lambda_b}{dt} = R_3 = \frac{1}{\tau_x} (E_b - \lambda_b) + \frac{1}{\tau_H} (1 - E_b) \left(1 - \frac{\tau_A^*}{\tau_x}\right) \quad (12)$$

$$\frac{d\lambda_s}{dt} = R_4 = \frac{\lambda_b - \lambda_s}{\tau_s} \quad (13)$$

$$\lambda = \eta \lambda_h + \psi \lambda_s + (1 - \eta - \psi) \lambda_b \quad (14)$$

其中, η 为热点的质量分数, ψ 是慢反应的质量分数。下标 h、b、s 分别表示热点、炸药反应主支及慢反应。

收稿日期: 2006-02-16; 修回日期: 2006-05-30

作者简介: 黄勇(1974-), 男, 助研, 从事流体力学和爆轰数值模拟研究。e-mail: huang_yong@iapcm.ac.cn

E_b 表示炸药主支的中间状态。特征时间 $\tau_h, \tau_e, \tau_x, \tau_{dx}, \tau_A^*, \tau_s$ 分别表示热点、能量传递、激发、激发逆过程、Arrhenius 反应、慢反应特征时间, τ_H 为均质反应特征时间, 其表达式为 $\tau_H = \tau_x \left(1 + \frac{\tau_A^*}{\tau_{dx}} \right)$ [1]。是热点反应的阈值。Hybrid 反应率的基本计算参数见表 1。

表 1 PBX9502 炸药 Hybrid 模型的基本参数
Table 1 Essential parameters of Hybrid reaction model for PBX9502

	ρ_0	τ_x	τ_s	ψ	G_0	θ_0	η	f_0
	/g · cm ⁻³	/ns	/ns			/K		
PBX9502	1.895	5.0	75	0.15	43.2	813	0.004	3E-5

由式(8)、(10~13)可以得到如下方程

$$\frac{d\lambda}{R} = \frac{d\lambda_h}{R_1} = \frac{dE_b}{R_2} = \frac{d\lambda_b}{R_3} = \frac{d\lambda_s}{R_4} \quad (15)$$

将式(15)代入式(9), 令 $f(\phi, p) = -\sqrt{v_0 \phi^3 [p - p_0 + \rho_0 u_0^2 (1 - \phi)] / a^2 \Delta x^2}$, 可以得到如下关系

$$\frac{d\lambda_h}{d\phi} = \frac{1}{R_1} f(\phi, p) \quad (16)$$

$$\frac{dE_b}{d\phi} = \frac{1}{R_2} f(\phi, p) \quad (17)$$

$$\frac{d\lambda_b}{d\phi} = \frac{1}{R_3} f(\phi, p) \quad (18)$$

$$\frac{d\lambda_s}{d\phi} = \frac{1}{R_4} f(\phi, p) \quad (19)$$

数值积分式(16~19), 必须要有炸药的状态方程。对于 PBX9502 炸药, 未反应部分采用 HOM 方程[4], 反应完全部分采用修正的 JWL 产物状态方程[2], 混合部分采用压力与温度平衡的状态关系, 这样便可以积分式(16~19), 最终得到 $\phi \sim \lambda$ 的积分曲线。

如果不考虑人为粘性, 即认为式(4)中的 q 等于 0, 可以得到相应状态下的瑞利线方程。不同的爆速 u_0 (即 D 值) 可以得到不同的瑞利线。

3 Hybrid 反应率与其他反应率的人为粘性与空间步长的匹配关系

对 PBX9502 炸药未反应物状态方程采用 HOM 方程, 产物状态方程分别采用修正的 JWL 方程及标准的 JWL 方程, 计算得到不同爆速下的瑞利线关系(见图 1)。

从图 1 可以看出, 爆速越大, 则 λ 的最高值也就越高, 并且 $D = D_{CJ} = 0.7621 \text{ cm} \cdot \mu\text{s}^{-1}$ 下得到的瑞利线

与 $\lambda = 1$ 的直线相切于 C-J 点[3], 此时 $\phi = 0.74108$ 。从图 1 还可以看出, 在爆速比较低的情况下, 标准和修正的 JWL 产物状态方程得到的瑞利线没有发生分离, 而在爆速比较高的情况下, 两者的瑞利线会产生分离, 这是因为修正的 JWL 产物状态方程对于炸药的超压状态做出修正的结果。

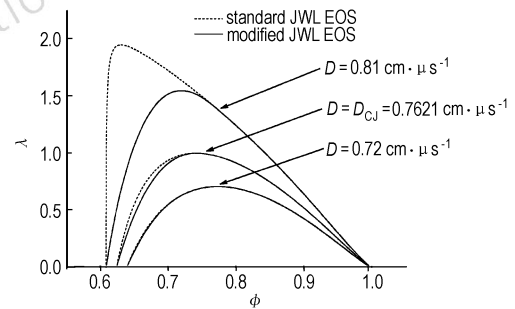


图 1 采用标准和修正的 JWL 产物状态方程得到的不同爆速下的瑞利线

Fig. 1 The Rayleigh line calculated by the standard and modified JWL equation of states (EOS) of the products

考虑人为粘性以后, 瑞利线形状会发生改变, 此时由方程(9)控制, 采用不同的人为粘与空间步长的匹配关系 $\beta = a\Delta x$, 积分式(16~19), 得到了 Hybrid 反应率下的瑞利积分曲线(见图 2)。其中图 2b 的 $\lambda = 1$ 和 $\lambda = 0$ 的曲线分别表示炸药产物和未反应物的两贡献曲线。

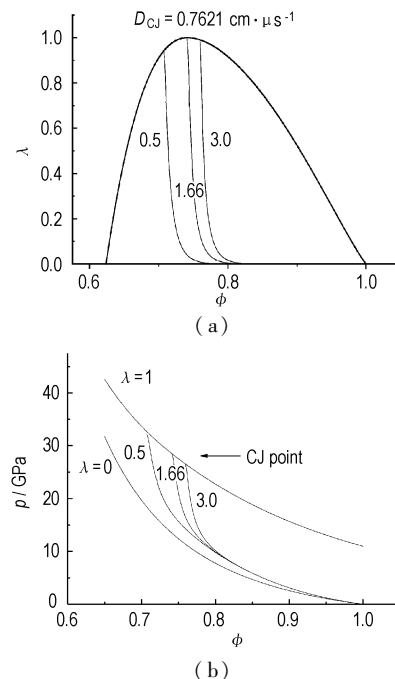


图 2 Hybrid 反应率下, 考虑人为粘性后得到的的瑞利积分曲线

Fig. 2 The integral Rayleigh line of Hybrid reaction model with the artificial viscosity

从图2可以看出,当 $\beta = 1.66 \text{ cm}$ 时,曲线积分直接到达C-J状态点。这一关系即是人为粘性与空间步长的最佳匹配关系^[3],采用此匹配关系计算得到的声速点状态符合C-J理论。当 $\beta > 1.66 \text{ cm}$ 时,计算结果可能出现爆速大于C-J爆速的弱爆轰情况。

当不考虑慢反应过程时,其瑞利积分曲线见图3。

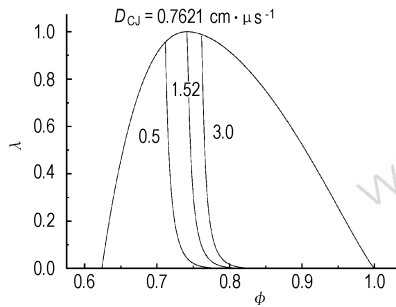


图3 不考虑慢反应的瑞利积分曲线

Fig. 3 Integral Rayleigh line without considering the slow reaction

从图3可以看出,不考虑慢反应的情况下,得到的 β ($\beta = 1.52 \text{ cm}$)比考虑慢反应时情况要小。这说明慢反应对于匹配关系的影响比较大。

当不考虑激化过程和均质反应过程时,即为JTF模型^[5]时,其瑞利积分曲线见图4。

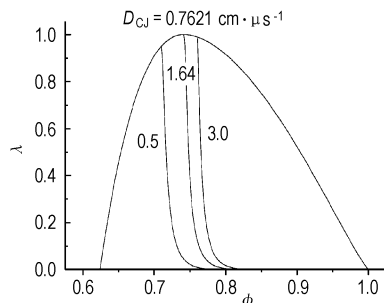


图4 JTF模型的瑞利积分曲线

Fig. 4 The integral Rayleigh line of JTF model

从图4可以看出,JTF模型得到的 β ($\beta = 1.64 \text{ cm}$)比Hybrid模型略低。

图3和图4的计算结果表明,慢反应部分对于人为粘性比配关系的影响最大,而激化及均质反应过程的影响较低,这说明慢反应是钝感炸药反应过程中的重要组成部分,对于炸药的放能过程有着重要影响。

4 人为粘性与空间步长匹配关系的应用

采用Hybrid反应率的人为粘性与空间步长的匹

配关系 $\beta = 1.66 \text{ cm}$,计算活塞推动PBX9502炸药的问题,空间步长 Δx 分别采用0.2, 0.1, 0.05, 0.035, 0.02 cm,活塞速度是常数,为 $0.14 \text{ cm} \cdot \mu\text{s}^{-1}$,炸药长度为10 cm。爆轰波的压力峰值及爆速随空间步长 Δx 变化规律见表2。 D 表示从 $5 \mu\text{s}$ 到 $10 \mu\text{s}$ 这一时间间隔内爆轰波的平均速度。

表2 爆轰波压力峰值及爆速随空间步长变化

Table 2 The peak pressure and velocity of detonation wave varied with the mesh size GPa

Δx /cm	$t/\mu\text{s}$						D /cm · μs^{-1}
	5.0	6.0	7.0	8.0	9.0	10.0	
0.2	28.12	28.39	28.42	28.25	28.19	28.36	0.7603
0.1	28.45	28.42	28.38	28.35	28.35	28.40	0.7611
0.05	28.51	28.48	28.43	28.41	28.43	28.45	0.7607
0.035	28.52	28.50	28.44	28.41	28.46	28.46	0.7611
0.02	28.52	28.46	28.44	28.45	28.46	28.48	0.7598

从表2可以看出,在这些空间步长条件下,压力峰值与 p_{C-J} 压力(28.5 GPa)非常接近,爆速值也接近C-J爆速,这表明以上推导的人为粘性与空间步长的匹配关系可以使爆轰速度及声速点状态满足C-J理论。

5 结论

本文采用Hybrid反应率和修正的JWL产物状态方程,导出了钝感炸药PBX9502的人为粘性和空间步长的匹配关系,并与其他反应率的匹配关系相比较,当采用此匹配关系时,可以使爆轰波的爆速及声速点后的流场与C-J理论一致,同时几乎不受空间步长的影响,这样便可以使网格宽度加宽,利于在实际工程中应用。

参考文献:

- [1] Tang P K. A study of the role of homogeneous process in heterogeneous high explosives[R]. LA-UR-93-1557, 1993.
- [2] Tang P K, Anderson W W, Fritz J N, et al. A study of the overdriven behaviors of PBX 9501 and PBX 9502[A]. 11th Symposium (International) Detonation[C], Office of Naval Research, ONR 33300-5, Colorado, USA, 1998, 1058-1064.
- [3] 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[J]. 爆炸与冲击, 1986, 6(2).
CAO Ju-zhen. Relation between artificial viscosity and mesh size in numerical modeling of detonation[J]. *Explosion and Shock Waves*, 1986, 6(2).
- [4] Mader C L. Numerical Modeling of Detonation[M]. Berkely, California: University of California Press, 1979.
- [5] Johnson J N, Tang P K, Forest C A. Shock-wave initiation of heterogeneous reactive solids[J]. *J Appl Phys*, 1985, 57(9): 4323-4334.

(下转 301 页)

Development and Application of Single-wavelength Pyrometer Used for Evaluating the Effects of Thermal Damage

XIE Li-jun^{1,2}, ZHOU Kai-yuan¹, LIU Geng-ran¹, YANG Zhi¹

(1. Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China;

2. Unit 75130 of the Chinese People's Liberation Army, Guigang 537103, China)

Abstract: A single-wavelength pyrometer used for evaluating the effects of thermal damage was developed, which offered a new method to describe the temperature changes of explosive products during the course of the explosion. The temperature of oxyacetylene flame was simultaneously measured by the pyrometer and a thermocouple. And the measurement error of the single-wavelength pyrometer is only 6.2%. The results indicate that the emissivity has little effect on temperature measurement of the oxyacetylene flame by the pyrometer. The pyrometer was also used to measure explosive products temperature of TNT. The curve of thermal damage of TNT was obtained, which shows the temperature changes of the explosive products of TNT, and the peak temperature of the curve is 3167.15 K.

Key words: explosion mechanics; single-wavelength pyrometer; explosive product; thermal damage

(上接 293 页)

Prediction of Enthalpy of Formation for Polynitro Compounds by Using Molecular Subgraph

SHAO Ke¹, TIAN De-yu¹, LIU Jian-hong¹, HONG Wei-liang¹,

ZHAO Feng-qi², LUO Zhong-kuan¹, CHEN Li¹, ZHAO Qi¹

(1. Normal College, Shenzhen University, Shenzhen 518060, China; 2. Xi'an Modern Chemistry Institute, Xi'an 710065, China)

Abstract: The enthalpies of formation for polynitro compounds were predicted by using the molecular structure descriptors (MSD). With the different groups of polynitro compound molecules acting as descriptor codes (i. e. molecular subgraphs), multiple linear regression equation was established, of which the correlation coefficient is 0.9980. Most of the relative errors of the calculated values are within 10%. It can be seen that the calculated values of the enthalpies of formation are in good agreement with the experimental values.

Key words: physical chemistry; molecular subgraph; enthalpy of formation; polynitro compound; multiple linear regression; molecular structure descriptor (MSD)

(上接 296 页)

Matching Relation Between Artificial Viscosity and Mesh Size in Numerical Modeling of Detonation of Insensitive High Explosives

HUANG Yong, PAN Hao, HU Xiao-mian

(National Key Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

Abstract: In numerical modeling of the plane detonation wave, the state behind steady detonation must be in agreement with the Chapman-Jouguet theory. The modified JWL equation of states (EOS) of the products and Hybrid reaction model are used to obtain the matching relation between artificial viscosity and mesh size of PBX9502 of insensitive high explosives and are compared with other reaction models. When this condition is satisfied, the detonation velocity and the state of sound speed point including pressure, density and internal energy can be in agreement with the C-J theory. These variables are independent of mesh size. Thus the mesh size can be larger, and the matching relation can be used in practice.

Key words: explosion mechanics; insensitive high explosive; artificial viscosity; mesh size