

文章编号: 1006-9941(2000)02-0091-04

计算混合炸药爆速的一种新方法

王克强

(洛阳师范高等专科学校化学系, 河南 洛阳 471022)

摘要: 提出了一种计算混合炸药爆速的方法。计算结果表明, 混合炸药的爆速计算值与实验值十分吻合, 平均误差 1.58%。

关键词: 爆速; 计算方法; 混合炸药

中图分类号: TQ560

文献标识码: A

1 引言

爆速是衡量炸药爆轰性能的重要参数之一, 也是计算炸药其它性能参数的基础数据。炸药爆速的计算方法大致可分为两类: 第一类是通过状态方程计算, 第二类是通过实验数据拟合计算。前者需要求解状态方程, 计算量大, 在实际应用中受到一定的限制; 后者计算相对简单, 通常能获得较满意的结果, 因而应用较广, 例如, Kamlet 方法^[1,2]、氮当量法^[3]及 Stine 方法^[4]就属于此类。但应用这些方法预估新型炸药的爆速时往往缺少新型炸药的生成热数据; 另一方面混合炸药爆速的计算需要根据假设的最大放热原理确定爆轰产物, 计算过程较为复杂, 因而其应用范围在一定程度上受到限制。笔者根据炸药的爆轰特性, 提出了一种计算混合炸药爆速的新方法, 该方法根据混合炸药中纯组分炸药的爆速、混合炸药的组成和装药密度计算爆速, 具有物理意义明确、计算结果可靠的特点。

2 基本原理和方法

根据化学热力学原理^[5], 混合物的性质与混合物中各组分的含量及性质有关, 对于理想混合物, 混合物的性质等于各组分的性质之和。我们将混合炸药作为一种“固体混合物”, 并将混合炸药的爆速作为“固体混合物”的一种特殊“性质”, 据此用热力学方法进行处理。

设混合炸药由炸药 I 和炸药 II 组成, 其中炸药 I 和炸药 II 的含量和爆速分别为 W_1 、 W_2 和 D_1 、 D_2 , 根据化学热力学原理, 混合炸药的爆速 D_m 为 W_1 、 W_2 、 D_1 、 D_2 的函数: $D_m = f(W_1, W_2, D_1, D_2)$ 。对于理想“固体混合物”, 即混合炸药中各种炸药之间不存在相互作用的混合体系, $D_m = W_1 D_1 + W_2 D_2$; 但对于实际“固体混合物”, 需对理想“固体混合物”的结果进一步修正为 $D_m = W_1 D_1 + W_2 D_2 + f(W_1, W_2)$, 式中 $f(W_1, W_2)$ 是与炸药 I 和炸药 II 的性质及含量有关的常数, 采用不同的方法进行修正, 可得不同的混合炸药爆速计算方法和计算公式。研究发现, 当取 $f(W_1, W_2) = B_1 \sqrt{D_1 D_2}$ 或 $f(W_1, W_2) = B_2 \sqrt{W_1 W_2}$ 时, 可得到良好的结果, 因此, 混合炸药的爆速可分别采用如下公式计算:

$$D_m = W_1 D_1 + W_2 D_2 + B_1 \sqrt{D_1 D_2} W_1 W_2 \quad (1)$$

$$D_m = W_1 D_1 + W_2 D_2 + B_2 \sqrt{W_1 W_2} \quad (2)$$

式中, B_1 、 B_2 为常数, 可用混合炸药爆速实验数据拟合得到。

确定式(1)和(2)的基本方法是, 首先对式(1)和式(2)进行变量代换, 将其转换为线性函数, 然后用最小二乘法拟合, 计算得到式中的常数。对于式(1), 令 $y = D_m - (W_1 D_1 + W_2 D_2)$, $x = \sqrt{D_1 D_2} W_1 W_2$, 可将式(1)转化为线性函数: $y = B_1 x$; 同理, 对于式(2), 可作变量代换: $y = D_m - (W_1 D_1 + W_2 D_2)$, $x = \sqrt{W_1 W_2}$, 将式(2)转化为线性函数: $y = B_2 x$ 。这样, 根据已知混合炸药爆速的实验数据 (W_{1i} , W_{2i} , D_{mi}), 可得一组 (x_i , y_i), 根据 (x_i , y_i), 计算 $y = Bx$ ($B = B_1$ 或 B_2) 中的常

收稿日期: 1999-10-25; 修回日期: 1999-11-29

作者简介: 王克强(1957-), 男, 副教授, 主要从事有机化合物和含能材料结构性能关系的研究, 发表论文一百余篇。

数 B 。确定 B 的原理是使误差平方和 $Q = \sum (y_i - Bx_i)^2$ 达到最小。根据极值原理, B 满足: $\partial Q / \partial B = -2 \sum (y_i - Bx_i) x_i = 0$, 则得: $B = \sum x_i y_i / \sum x_i^2$ 。这样即可计算得到 B_1 和 B_2 。文献[6]中给出了较为详细的线性函数拟合的数学原理和计算程序, 可参考。本文用计算机拟合得到 $B_1 = 0.297\ 26$, $B_2 = 0.147\ 160$ 。式(1)和式(2)是计算二元混合炸药爆速的基本公式, 对于 n 元混合炸药, 根据化学热力学的溶液理论, 将式(1)和式(2)推广为:

$$D_m = \sum_i W_i D_i + \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n B_1 \sqrt{D_i D_j} W_i W_j \quad (3)$$

$$D_m = \sum_i W_i D_i + \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n B_2 \sqrt{W_i W_j} \quad (4)$$

显然, 式中第一个求和项为理想“固体混合物”的爆速, 第二个求和项是对理想“固体混合物”爆速的修正即混合炸药中各组分之间的相互作用对爆速的影响。式(1)~(4)揭示了混合炸药爆速与混合炸药组成及纯组分炸药的爆速之间的定量关系, 据此可预估混合炸药的爆速。

3 计算结果与讨论

为确定式(1)~(4)的可靠程度, 我们用式(1)和式(2)计算了27种混合炸药的爆速 D_m (cal), 部分计算结果及文献值 D_m (exp)^[7-10] 列于表1, 以便进行比较。

表1 混合炸药爆速计算值 D_m (cal) 与实验值 D_m (exp) 的比较
Table 1 Comparison of calculated detonation velocity, D_m (cal), of some composite explosives with experimental data, D_m (exp)

No	混合炸药	$W_1/\%$	$W_2/\%$	$\rho_0/\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	D_m (exp) ^[7-10]	式(1)计算结果			式(2)计算结果		
						D_m (cal)	E_1	$E_2/\%$	D_m (cal)	E_1	$E_2/\%$
1	RDX/TNT	50.0	50.0	1.627	7.660	7.581	-0.079	-1.03	7.576	-0.084	-1.04
2	RDX/TNT	60.0	40.0	1.715	7.890	7.881	-0.009	-0.11	7.876	-0.014	-0.01
3	RDX/TNT	65.0	35.0	1.715	8.060	7.935	-0.125	-1.55	7.932	-0.128	-1.59
4	RDX/TNT	75.0	25.0	1.648	7.952	7.855	-0.097	-1.22	7.859	-0.093	-1.17
5	HMX/TNT	76.3	23.7	1.809	8.452	8.311	-0.141	-1.67	8.315	-0.137	-1.62
6	PETN/TNT	40.0	60.0	1.673	7.303	7.557	0.254	3.48	7.552	0.249	3.41
7	PETN/TNT	50.0	50.0	1.682	7.662	7.678	0.016	0.21	7.672	0.010	0.13
8	TNT/RDX	50.0	50.0	1.680	7.750	7.683	-0.067	-0.86	7.688	-0.062	-0.81
9	TNM/NB	75.0	25.0	1.470	7.662	7.289	-0.373	-4.87	7.290	-0.372	-4.86
10	583/7610	96.5	3.5	1.718	8.318	8.304	-0.014	-0.17	8.321	0.003	0.04
11	583/4#	97.0	3.0	1.788	8.277	8.565	0.288	3.48	8.581	0.304	3.68
12	CE/TNT	60.0	40.0	1.620	7.330	7.264	0.066	-0.90	7.263	-0.067	-0.91
13	CE/TNT	60.0	40.0	1.639	7.390	7.296	-0.094	-1.27	7.296	-0.094	-1.28
14	PETN/TNT	60.0	40.0	1.650	7.730	7.717	-0.013	-0.17	7.713	-0.017	-0.22
15	PETN/TNT	25.0	75.0	1.623	7.250	7.323	0.073	1.01	7.327	0.077	1.06
16	PETN/TNT	20.0	80.0	1.600	7.200	7.236	0.036	0.50	7.244	0.044	0.61
17	PETN/TNT	10.0	90.0	1.624	7.100	7.150	0.050	0.70	7.165	0.065	0.92

注: E_1 和 E_2 分别为爆速计算结果的绝对误差和相对误差。

混合炸药中纯组分炸药的爆速采用下式计算:

$$D = 1.678\ 0 + \frac{-60.981\ 3n_c - 18.681\ 3n_H + 106.124\ 1n_o + 66.561\ 5n_N}{M} \rho_0 - 0.637\ 7OB \quad (5)$$

式中, M 为炸药的分子量, n_c 、 n_H 、 n_o 和 n_N 分别表示炸药分子中的碳、氢、氧和氮的原子数, ρ_0 为装药密度, OB 为炸药的氧平衡 $OB = (n_o - 2n_c - n_H/2)/M \times$

100%。式(5)是作者提出的纯组分炸药爆速计算公式, 计算过程中既不需要炸药的生成热数据又不需要根据一定的规则确定爆轰产物, 可直接根据炸药的组

成和装药密度计算爆速。利用式(5)计算了 80 多个纯组分炸药的爆速,平均误差 2.2%,大部分炸药爆速

的计算误差在 2% 以内,其结果与实验值^[7-10]吻合较好。表 2 列出了部分结果。

表 2 部分纯单质炸药的爆速计算值 $D(\text{cal})$ 与实验值 $D(\text{exp})$ 的比较
Table 2 Calculated detonation velocity, $D(\text{cal})$, of some single explosives

compared with experimental data, $D(\text{exp})$									$\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$
No	炸 药	分子式	M	OB	ρ_0	$D(\text{exp})$	$D(\text{cal})$	E_1	$E_2/\%$
1	DATB	$\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_5\text{N}_6$	241	-3.9	1.790	7.520	7.690	0.17	2.26
2	HNS	$\text{C}_{14}\text{H}_6\text{O}_6\text{N}_{12}$	438	-5.7	1.700	7.000	7.142	0.14	2.03
3	NG	$\text{C}_3\text{H}_5\text{O}_9\text{N}_3$	227	0.2	1.600	7.700	7.732	0.03	0.41
4	2 [#]	$\text{C}_6\text{H}_8\text{N}_{10}\text{O}_{16}$	476	0	1.830	8.876	8.786	-0.09	-1.02
5	4 [#]	$\text{C}_5\text{H}_6\text{N}_6\text{O}_{14}$	374	0.3	1.694	8.158	8.159	0	0.01
6	TNT	$\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_6$	227	-4.6	1.595	6.856	6.851	0	-0.07
7	TNB	$\text{C}_6\text{H}_3\text{N}_3\text{O}_6$	213	-3.5	1.662	7.347	7.159	-0.19	-2.56
8	RDX	$\text{C}_3\text{H}_6\text{N}_6\text{O}_6$	222	-1.4	1.796	8.741	8.538	-0.20	-2.32
9	HMX	$\text{C}_4\text{H}_8\text{N}_8\text{O}_8$	296	-1.4	1.850	8.917	8.719	-0.20	-2.22
10	CE	$\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_5\text{O}_8$	287	-3.0	1.692	7.502	7.469	-0.03	-0.45
11	662	$\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_6\text{O}_7$	236	-0.4	1.878	9.039	8.989	-0.05	-0.55
12	PETN	$\text{C}_5\text{H}_8\text{N}_4\text{O}_{12}$	316	-0.6	1.732	8.083	8.033	-0.05	0.61
13	7201	$\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_{12}\text{O}_{14}$	468	0	1.964	9.362	9.417	0.06	0.59
14	7901	$\text{C}_5\text{H}_8\text{N}_8\text{O}_{10}$	340	-1.2	1.780	8.557	8.396	-0.16	-1.88
15	7610	$\text{C}_4\text{H}_6\text{N}_6\text{O}_8$	266	-1.1	1.785	8.552	8.388	-0.16	-1.92
16	7814	$\text{C}_5\text{H}_8\text{N}_6\text{O}_8$	280	-2.1	1.750	8.100	8.010	-0.09	-1.11
17	799	$\text{C}_7\text{H}_{10}\text{N}_{10}\text{O}_{14}$	458	-1.1	1.766	8.471	8.306	-0.17	-1.95
18	DDNP	$\text{C}_6\text{H}_2\text{N}_4\text{O}_5$	210	-3.8	0.900	5.700	5.795	0.09	1.66

注: E_1 和 E_2 分别为爆速计算结果的绝对误差和相对误差。

表 1 数据表明,计算二元混合炸药爆速的式(1)和式(2)计算值与实验值的一致性令人满意,计算结果的平均绝对误差为 $0.12 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$,绝大部分混合炸药的计算误差在 2% 以内,且误差分布比较均匀,平均相对误差为 1.58%,其中最大相对误差为 4.87%,说明用式(1)和式(2)计算二元混合炸药爆速较为可靠。式(3)和式(4)是对二元混合炸药的推广,因目前多元混合炸药爆速数据较少,其可靠性有待于实验作进一步检验。

参考文献:

- [1] Kamlet M J. Chemistry of detonation I. A simplified method for calculation detonation properties of CHON explosives[J]. J. Chem. Phys., 1968, 48(1): 23.
- [2] Kamlet M J. Chemistry of detonation IV. Evaluation of a simple prediction method for detonation velocities of explosives[J]. J. Chem. Phys., 1968, 48(8): 3685.

- [3] 国迂贤,张厚生. 炸药爆轰性质计算的氮当量公式及修正氮当量公式: 炸药爆速计算[J]. 爆炸与冲击, 1983, 3(3): 563.
- [4] 李金山. 计算含能材料爆速的 Stine 方法的进一步研究[J]. 火炸药学报, 1996(1): 43.
- [5] Sandler S I. 化学与工程热力学[M]. 吴志高. 北京: 化学工业出版社, 1985.
- [6] 徐士良. FORTRAN 常用算法程序集(第二版)[M]. 北京: 清华大学出版社, 1995.
- [7] 王克强. 炸药的分子结构与其加速金属能力之间关系的研究[D]. 兵器工业部第 214 研究所, 1984.
- [8] 李金山. 计算含能材料爆速的一种新方法[J]. 火炸药学报, 1994(3): 28.
- [9] 秦尚文. 爆炸物品安全管理[M]. 成都: 四川科学技术出版社, 1988.
- [10] 刘贵喜. 炸药爆轰参数与破甲威力的关系[J]. 火炸药学报, 1983(6): 18.

A New Method for Calculating the Detonation Velocity of Composite Explosives

WANG Ke-qiang

(Department of Chemistry, Luoyang Normal College, Luoyang 471022, China)

Abstract: Based on the characteristics of single explosives, their detonation velocity is correlated to the constituents of composite explosives and a new method is developed therefrom to calculate and predict the detonation velocity of composite explosives. The results show that the calculated detonation velocity is in good agreement with an average deviation of 1.58% to the experimental data.

Key words: detonation velocity; calculation method; composite explosives

本刊加入万方数据资源系统 (ChinaInfo) 数字化期刊群的声明

为了实现科技期刊编辑、出版发行工作的电子化,推进科技信息交流的网络化进程,本刊现已入网“万方数据资源系统 (ChinaInfo) 数字化期刊群”,所以,向本刊投稿并录用的文章,将一律由编辑部统一纳入万方数据资源系统 (ChinaInfo),进入因特网提供信息服务。凡有不同意见者,请另投它刊。本刊所付稿酬包含刊物内容上网服务报酬,不再另付。

万方数据资源系统 (ChinaInfo) 数字化期刊群是国家“九五”重点科技攻关项目,截止 1999 年 7 月已有 600 种期刊全文上网 (网址: <http://www.chinainfo.gov.cn/periodical>),将在年内增至 1000 余种科技期刊。本刊全文内容按照统一格式制作编入万方数据资源系统 (ChinaInfo),读者可上因特网进入万方数据资源系统 (ChinaInfo) 免费 (一年后开始酌情收费) 查询浏览本刊内容,也欢迎各界朋友通过万方数据资源系统 (ChinaInfo) 向我刊提出宝贵意见、建议或征订本刊。