

文章编号: 1006-9941(2008)02-0171-04

# 高能炸药水中爆炸能量输出特性数值分析

张志江, 徐更光

(北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081)

**摘要:** 多介质数值计算中对于高压比和高密度比的介质界面间的处理一直以来是个难点,而且目前的计算精度都不高。本工作采用位标函数捕捉物质界面,用修正的虚拟流体方法对界面进行了处理,其中含能材料爆轰产物 JWL 状态方程系数通过 Kihara-Hikita-Tanaka (KHT) 计算的等熵膨胀数据拟合得到,并实现了程序化。对 TNT 和 PETN 两种高能炸药在水中爆炸的能量输出特性进行了计算,结果表明,本工作的计算结果与实验相似律计算结果比较吻合,误差在 10% 以内。

**关键词:** 爆炸力学; 水下爆炸; 相似律; 虚拟流体方法

**中图分类号:** O389; TJ55

**文献标识码:** A

## 1 引言

目前 TVD、MUSCL、WENO 等数值格式<sup>[1-2]</sup>能够比较稳定地捕捉高分辨率激波,但在两种物质界面处会引起虚假的数值振荡,带来较大误差使计算无法进行下去。水下爆炸问题涉及到了两种介质的高压比和高密度比,由于界面上计算精度的降低导致整个计算精度不高。Fedkiw 等<sup>[3]</sup>提出了虚拟流体的方法(GFM),Liu<sup>[4-6]</sup>在此基础上提出了一种改进的虚拟流体方法(MGFM),该方法通过求解界面上的 Riemann 问题解来构造虚拟流体状态,大大提高了界面计算的精度。Level-Set 方法是定义一个距离函数来捕捉界面的运动变化,在数学处理上容易,方便推广到多维问题<sup>[7]</sup>。

本工作采用了 Level-Set 和 MGFM 方法,开发了二维水下爆炸计算程序,计算了 TNT 和 PETN 在水中爆炸的情况,并且把计算结果与相似律求得结果进行了对比分析。

## 2 数值计算方法

### 2.1 基本控制方程

令  $\rho, p$  和  $e$  分别表示密度、压力和单位质量的内能,下文与之相同。 $u$  和  $v$  分别表示  $x$  和  $y$  方向的速度分量, $E = e + \frac{u^2 + v^2}{2}$  和  $H = E + \frac{p}{\rho}$  分别表示单位质量的总能和总焓,二维直角坐标下的 Euler 方程可写成如下形式:

$$\begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{bmatrix}_t + \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix}_x + \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho E + p) \end{bmatrix}_y = 0 \quad (1)$$

或者可以简写成:  $U_t + F(U)_x + G(U)_y = 0$

其中,  $U = (\rho, \rho u, \rho v, \rho E)^T$ 。

### 2.2 计算方法

对  $F_x$  和  $G_y$  在空间上采用文献[8]中张涵信提出的三阶精度的 ENN 有限差分格式进行差分离散,而在时间上采用三阶精度的 Runge-Kutta 法进行差分离散。采用 Level-Set 对内边界进行追踪,然后利用改进的 GFM 方法对边界进行处理<sup>[1-7,9]</sup>。

## 3 状态方程

### 3.1 水的状态方程

水采用刚性状态方程

$$p = \beta \left( \frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - \beta + \alpha \quad (2)$$

其中,  $\gamma = 7.15, \alpha = 0.1 \text{ MPa}, \beta = 331 \text{ MPa}, \rho_0 = 1 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

另外,定义内能为  $e = \frac{\beta \rho^{\gamma-1}}{(\gamma-1)\rho_0^\gamma} + \frac{\beta - \alpha}{\rho}$

### 3.2 爆轰产物状态方程

(1) 爆轰产物采用 JWL 状态方程,即

$$p = A \left( 1 - \frac{\omega \rho}{R_1 \rho_0} \right) \exp \left( - \frac{R_1 \rho_0}{\rho} \right) + B \left( \frac{\omega \rho}{R_2 \rho_0} \right) \exp \left( - \frac{R_2 \rho_0}{\rho} \right) + \frac{\omega e \rho}{\rho_0} \quad (3)$$

其中,  $A, B, C, R_1, R_2$  和  $\omega$  为与特定炸药爆轰产物相关的待定系数,  $\rho_0$  是装药密度。

收稿日期: 2007-07-10; 修回日期: 2007-11-30

基金项目: 国家“973”研究项目(65140010102)

作者简介: 张志江(1979-),男,博士,从事爆炸及冲击数值模拟研究。

e-mail: zhangzj@bit.edu.cn

(2) JWL 状态方程系数拟合方法<sup>[10]</sup>

JWL 状态方程满足 CJ 爆轰理论,在爆速、爆压和爆热已知的情况下,有下面三个方程式成立,

$$p_{CJ} = A \exp(-R_1 V_{CJ}) + B \exp(-R_2 V_{CJ}) + \frac{C}{V_{CJ}^{\omega+1}} \quad (4)$$

$$AR_1 \exp(-R_1 V_{CJ}) + BR_2 \exp(-R_2 V_{CJ}) + \frac{C(1+\omega)}{V_{CJ}^{\omega+2}} = \rho_0 D^2 \quad (5)$$

$$\frac{A \exp(-R_1 V_{CJ})}{R_1} + \frac{B \exp(-R_2 V_{CJ})}{R_2} + \frac{C}{\omega V_{CJ}^{\omega}} = Q_0 + \frac{1}{2} p_{CJ} (1 - V_{CJ}) \quad (6)$$

式中,  $p_{CJ}$  为爆压,  $D$  为爆速,  $Q_0$  为爆热,  $V_{CJ}$  为 CJ 态比容。由 (4)(5)(6) 三式确定六个未知数  $A, B, C, R_1, R_2$  和  $\omega$ 。先根据经验假定一组  $R_1, R_2$  和  $\omega$  的数值,与计算的爆轰参数一起代入上面三式,解出  $A, B, C$  的值。再将所得的参数代入 JWL 等熵状态方程中得出  $p$ - $V$  关系,与 KHT (Kihara-Hikita-Tanaka) 状态方程计算的爆轰产物等熵膨胀数据比较。若不符,重新设  $R_1, R_2$  和  $\omega$  来求解  $A, B, C$  的值,直到两个状态方程计算出的结果一致为止,这个时候, JWL 状态方程的系数就完全确定了。

按照上述方法,计算求得密度为  $1.57 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  TNT 的参数为  $D = 6700 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}, A = 985.007 \text{ GPa}, B = 39.0702 \text{ GPa}, C = 2.34171 \text{ GPa}, R_1 = 6.61, R_2 = 2.3, \omega = 0.43, Q_0 = 8.064 \text{ kJ} \cdot \text{cm}^{-3}$ ; 密度为  $1.76 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  PETN 的参数为  $D = 8309 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}, A = 2282.87 \text{ GPa}, B = 67.0808 \text{ GPa}, C = 3.26323 \text{ GPa}, R_1 = 7, R_2 = 2.14, \omega = 0.54, Q_0 = 11.25 \text{ kJ} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

4 TNT 和 PETN 能量输出特性计算

根据上面的方法编写了二维的计算程序,后处理用 Origin 和 Tecplot 软件。分别计算了 TNT 和 PETN 两种高能炸药在水深 5 m 处爆炸的情况,如图 1 所示。

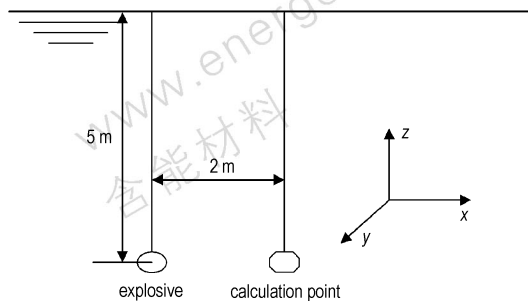


图 1 计算区域示意图

Fig. 1 The sketch map of simulation area

计算区域是  $[x] \times [y] = [0, 2.5 \text{ m}] \times [0, 2.5 \text{ m}]$ ,

网格数是  $500 \times 500$ 。数值计算后得到的数据根据 (7) 式和 (8) 式分别求相关的冲击波参量。

$$I = \int_0^{5\theta} p dt \quad (7)$$

$$E = \frac{1}{\rho_0 c_0} (1 - 2.422 \times 10^{-4} p_m - 1.031 \times 10^{-8} p_m^2) \int_0^{5\theta} p^2 dt \quad (8)$$

其中,  $p$  是冲击波压力;  $I$  是冲量;  $E$  是能流密度;  $p_m$  是峰值压力,  $p_m$  在 (8) 式中的单位是 MPa<sup>[11]</sup>;  $\theta$  是冲击波峰值  $p_m$  衰减到  $\frac{p_m}{e}$  时所用时间,这里的  $e$  是自然对数;  $\rho_0 c_0$  是水介质的声阻抗,  $\rho_0$  是水的密度,  $c_0$  是水中常温常压下的声速,为  $1450 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

水中爆炸相关的相似律计算公式为: Parameter =  $\kappa \left[ \frac{\sqrt[3]{W}}{R} \right]^\varepsilon$ , 其中,  $W$  是药量,  $R$  是到爆源的距离,  $R = \sqrt{x^2 + y^2}$ ,  $\kappa$  和  $\varepsilon$  是常数。炸药相似律系数见表 1<sup>[12]</sup>。

如求解 TNT 的水中爆炸冲量  $I$ , 其相似律可以表达为:  $I/W^{1/3} = 5.75 \left[ \frac{\sqrt[3]{W}}{R} \right]^{0.89}$ 。

表 1 TNT 和 PETN 炸药相似律系数<sup>[12]</sup>  
Table 1 Similar coefficients of TNT and PETN

explosives	$\rho$ / $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	parameter							
		$p_m$		$\theta/W^{1/3}$		$I/W^{1/3}$		$E/W^{1/3}$	
		$\kappa$	$\varepsilon$	$\kappa$	$\varepsilon$	$\kappa$	$\varepsilon$	$\kappa$	$\varepsilon$
TNT	1.57	52.4	1.13	0.084	-0.23	5.75	0.89	84.4	2.04
PETN	1.76	63.26	1.20	0.085	-0.30	-	-	-	-

用本文第 2 节提到的方法分别对 1 kg 密度为  $1.57 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  的 TNT 和  $1.76 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  的 PETN 在水下 5 m 处的爆炸情况进行模拟计算,结果见表 2 和表 3, 仅列出 TNT 的压力波形变化时刻,如图 2 所示,二者的压力-时间曲线如图 3 所示。

表 2 本文方法计算 TNT 冲击波参数与相似律求得结果对比  
Table 2 Results between the calculations and similar rules for TNT

$R/m$	$p_m/\text{MPa}$		$\theta/\mu\text{s}$		$E/\text{m} \cdot \text{kPa}$		$I/\text{kPa} \cdot \text{s}$	
	similar rule	calculated	similar rule	calculated	similar rule	calculated	similar rule	calculated
	0.5	114.0	113.5	71.6	70.6	347	333.7	10.6
1.0	52.4	51.8	84.0	78.4	84.4	75.8	5.7	5.1
1.5	33.0	32.1	92.2	80.4	37.0	30.0	4.0	3.5
2.0	24.0	23.9	98.5	96.9	20.5	17.9	3.1	2.4

表 3 本文方法计算 PETN 冲击波参数与相似律求得结果对比

Table 3 Results between the calculations and similar rules for PETN

R/m	$p_m/\text{MPa}$		$\theta/\mu\text{s}$		$E/m \cdot \text{kPa}$		$I/\text{kPa} \cdot \text{s}$	
	similar rule	calculated	similar rule	calculated	similar rule	calculated	similar rule	calculated
0.5	145.3	144.8	69.0	71.5	-	561.3	-	13.0
1.0	63.3	65.4	85.0	79.6	-	125.8	-	6.5
1.5	38.9	43.8	96.0	81.7	-	55.9	-	4.3
2.0	27.5	29.7	104.6	85.2	-	24.6	-	2.7

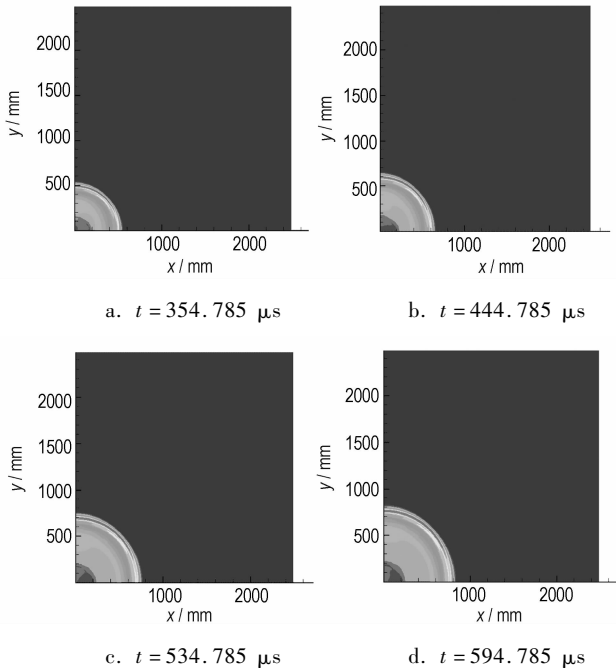


图 2 1 kg TNT 水下爆炸计算的压强变化图  
Fig.2 Pressure change from calculation for 1 kg TNT underwater explosion

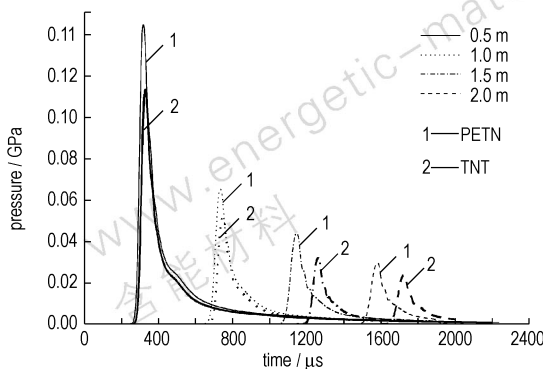


图 3 1 kg TNT 和 1 kg PETN 水下爆炸计算的压强曲线  
Fig.3 Pressure-time curves from calculation for 1 kg TNT and 1 kg PETN underwater explosion

从表 2、表 3 及图 3 对比可看出,对 TNT 而言,用本程序计算的结果比相似律求得各冲击波参数值略微偏小,而 PETN 则相反。这是由于数值计算本身固有的数值粘性使得冲击波衰减时间与实际情况存在偏差所致。两者求得的冲击波峰值误差都很小,基本上控制在 5% 之内。工程上研究对目标进行毁伤的有效载荷大小主要从冲击波超压和冲量两个方面来考虑,从求解的结果可以看出,超压和冲量的误差都能够控制在 10% 之内,完全可以为分析高能炸药的能量输出特性服务。PETN 的能流密度虽然没有相关的相似律结果来参照,但是分析两米远处的计算值,PETN 的冲击波能是 TNT 的 1.37 倍,与文献[11]中 PETN 的冲击波能是 TNT 的 1.369 倍一致,所以计算值是与实际情况相符合的。

### 5 结 论

本文采用的计算方法都是流体动力学数值计算中精度比较高,界面处理比较容易,对于水下爆炸界面压比较大的情况,改进的 GFM 方法能够很好处理。而且 Level-Set 函数捕捉界面在数学及编程实现上都是非常容易的。从两种高能炸药水中爆炸计算情况看出,计算结果与工程实际一致。给定某种含能材料,采用 KHT 计算它的等熵膨胀数据后拟合出爆轰产物 JWL 状态方程系数,确定了爆轰产物状态就可以用本程序分析出它在水中的能量输出特性。这是个完整的对未知含能材料的能量输出特性的计算分析体系,可以在实验前进行估计,为实验服务。

致谢：在程序的编写过程中,新加坡高性能计算研究所的刘铁钢博士和北京理工大学王成副教授给予作者极大且细心的帮助,在此表示最诚挚的感谢。

#### 参考文献：

- [1] Shu C W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws[R]. ICASE Report No. 97265, NASA/CR-97-206253, 1997.
- [2] Balsara D, Shu C W. Monotonicity preserving weighted essentially non-oscillatory schemes with increasingly high order of accuracy[J]. *J Comput Phys*, 2000, 160: 405 - 452
- [3] Ronald P Fedkiw, Tariq Aslam. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the Ghost fluid method) [J]. *J Comput Phys*, 1999, 152: 457 - 492.
- [4] Liu T G, Khoo B C, Yeo K S. Ghost fluid method for strong shock impacting on material interface[J]. *J Comput Phys*, 2003, 190: 651 - 681.
- [5] Liu T G, Khoo B C, Yeo K S. The simulation of compressible multi-medium flow. Part I: A new methodology with test applications to 1D

- gas-gas and gas-water cases[J]. *Comp & Fluids*, 2001, 30(3): 291-314.
- [6] Liu T G, Khoo B C, Wang C W. The Ghost fluid method for compressible gas-water simulation[J]. *J Comput Phys*, 2005, 204: 193-221.
- [7] David Adalsteinsson, James A. Sethian. A fast level set method for propagating interfaces[J]. *J Comput Phys*, 1995, 118: 269-277.
- [8] 水鸿寿. 一维流体力学差分方法[M]. 北京: 国防工业出版社, 1998.
- [9] Quartapelle L, Castelletti L. Solution of the Riemann problem of classical gasdynamics[J]. *J Comput Phys*, 2003, 190: 118-140.
- [10] 薛再清. 爆轰产物状态方程及含铝炸药的爆炸过程[D]. 北京: 北京理工大学机电工程学院, 1998.
- [11] Michael M, Swisdak Jr. Explosion effects and properties: part 2-explosion effects in water [R]. ADA 056694, 1978.
- [12] 李澎. 非理想炸药水下爆炸能量输出结构研究[D]. 北京: 北京理工大学, 2006.

## Numerical Analysis on Energy Output of Underwater Explosion for High Energetic Explosives

ZHANG Zhi-jiang, XU Geng-guang

(State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

**Abstract:** The interface of the multi-medium fluid was caught with Level-Set and the interface was dealt with modified Ghost Fluid Method. The coefficients of JWL about detonations were obtained from isentropic expansion data calculated by Kihara-Hikita-Tanaka (KHT) and were programmed. The energy output of underwater explosion for TNT and PETN was calculated. Results show that energy output calculated by the program is consistent with that calculated by explosion similar rules, and the error is less than 10%.

**Key word:** explosion mechanics; underwater-explosion; similar-rule; ghost fluid method (GFM)

(上接 170 页)

## Predicting the Impact Sensitivity of Explosives by Artificial Neural Network

WANG Guo-dong<sup>1,2</sup>, LIU Yu-cun<sup>2</sup>

(1. Ordnance Engineering College, Shijiazhuang 050003, China;

2. Department of Environment and Safety Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China)

**Abstract:** A method was introduced for predicting impact sensitivity of explosives by the artificial neural networks. Combining with the topological parameters and the quantum-chemical parameters which obtained by analyzing the fully optimized geometries and the vibration analysis of 36 CHON explosive molecules using the density functional theory (DFT) method at the B3LYP/6-31G\* level, seven molecular descriptors close related to  $H_{50}$  were selected, including total electronic energy, lower unoccupied molecular orbital energy, oxygen balance index, number of oxygen atoms, active index, indicator of aromaticity (0 or 1), indicator of —CH in  $\alpha$  (0 or 1). And the artificial neural network (ANN) with these descriptors as neurons in the input layer was established to predict impact sensitivity of explosives. The predicted data of the ANN were compared with experimental and those of two traditional models established by the oxygen balance index ( $OB_{100}$ ) and the active index ( $F$ ) respectively. Results show that the root mean squares errors of ANN model is 17.84 cm and that of the two traditional models is 42.71 cm and 36.47 cm respectively.

**Key words:** physical chemistry; artificial neural network; impact sensitivity; quantum-chemical parameter