

文章编号: 1006-9941(2018)01-0094-07

# 凝聚相炸药拐角爆轰的数值模拟

王星<sup>1</sup>, 姜胜利<sup>1</sup>, 赵寒月<sup>1</sup>, 余一<sup>1,2</sup>, 张蕾<sup>1,2</sup>, 陈军<sup>1,2</sup>

(1. 中国工程物理研究院高性能数值模拟软件中心, 北京 100088; 2. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

**摘要:** 基于多介质可压缩流体方程和炸药反应速率方程构建了三维凝聚相炸药爆轰的物理模型, 建立了适用于多相爆轰混合反应区计算的热力学平衡迭代方法并开发了高效稳定的爆轰并行模拟软件, 基于对比试验验证了物理模型、数值方法和软件模块的正确性。通过数值模拟不同拐角的爆轰过程, 重点研究了凝聚相炸药拐角爆轰的波阵面结构、流场与化学反应的相互耦合和拐角处的二次起爆机理。结果表明, PBX9404 炸药 135°拐角比 90°拐角衍射范围更大, 波阵面结构受到当地流场波速的影响; 爆轰波绕过拐角后由于流场涡流作用导致化学反应与前导激波解耦, 形成临时“死区”, 随着拐角增大, 拐角死区范围扩大; 死区二次起爆的关键是混合反应区回爆波的作用时间大于拐角区域起爆的临界诱导时间。

**关键词:** 凝聚相炸药; 拐角爆轰; 数值模拟**中图分类号:** TJ55; O382.+1**文献标志码:** A**DOI:** 10.11943/j.issn.1006-9941.2018.01.012

## 1 引言

凝聚相炸药的拐角爆轰一直是爆轰波研究和武器装备设计的重点关注的问题, 涉及到拐角的绕射、熄爆及重新起爆。从 20 世纪 60 年代, 国内外针对凝聚相炸药拐角爆轰进行了大量的数值模拟研究。Tarver<sup>[1]</sup>采用点火增长模型对不同炸药的拐角绕射现象进行了数值模拟, 讨论了不同拐角下的反应延迟; Tang 等<sup>[2]</sup>把显式的热点模型应用到 DYNA2D 程序中, 模拟了 PBX-9502 炸药中爆轰波绕射情况; 冯长根<sup>[3]</sup>利用二维拉格朗日数值程序 2DLE, 对混合炸药中爆轰波拐角绕射现象进行了数值模拟; 孙承纬<sup>[4]</sup>利用程序 WSU, 对几种炸药的拐角爆轰现象进行了数值模拟。以上研究集中讨论了凝聚相炸药拐角爆轰的绕射现象, 给出了不同拐角下对爆轰波衍射波结构的影响, 但由于采用了经典的爆轰物理模型, 忽略了多介质的影响, 没有重点考虑拐角区域的熄爆和重新起爆过程。

由于拐角的存在, 爆轰波在绕过拐角过程可能发生熄爆, 实验上并不能很好解释“死区”效应<sup>[5]</sup>, 尤其

很难定义“死区”的作用尺寸和作用时间。Banks<sup>[6-7]</sup>从数值角度分析了 LX-17 炸药在拐角处的绕射过程, 给出了拐角内壁面区域炸药状态变化规律, 发现了沿内壁面的熄爆和二次起爆现象, 但 Banks 采用了基于质量分数的多物质爆轰模型<sup>[7]</sup>, 在多介质混合热力学状态计算时存在数值不收敛, 不能准确的描述爆轰波流场与化学反应的耦合相互作用。

为此, 本研究将质量分数的多物质爆轰模型改进为体积分数, 以消除多介质混合区域的计算误差, 并发展适用于多介质爆轰反应区计算的平衡迭代方法, 自主搭建高性能的并行模拟软件 DESEM。通过高效高分辨率的数值模拟研究拐角区域爆轰流场与化学反应的耦合-解耦过程, 对比分析了爆轰衍射的波阵面结构, 并讨论了拐角爆轰的熄爆和二次起爆的机理。

## 2 凝聚相炸药爆轰物理模型

### 2.1 守恒型方程

凝聚相炸药爆轰是极端条件下发生的复杂动力学响应过程, 涉及到炸药、爆轰产物和周围介质等多种物质; 由于爆轰过程的高速瞬态性, 可以忽略此过程的粘性和热传导过程, 将爆轰过程的控制方程写成如下守恒形式:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{h}(\mathbf{u})}{\partial z} = \mathbf{H} + \mathbf{S} \quad (1)$$

式中,  $\mathbf{u}$  为守恒型变量,  $\mathbf{f}$ ,  $\mathbf{g}$ ,  $\mathbf{h}$  为不同方向的流量,

收稿日期: 2017-10-10; 修回日期: 2017-11-22

基金项目: 国防基础科学研究挑战专题(TZ2017002), 国家重点研发计划(2017YFB0202403)

作者简介: 王星(1986-), 男, 助理研究员, 主要从事炸药安全性评估数值模拟研究。e-mail: wang\_xing@iapcm.ac.cn

通信联系人: 陈军(1969-), 男, 研究员, 主要从事爆轰物理, 高能炸药反应机理数值模拟研究。e-mail: jun\_chen@iapcm.ac.cn

$H$  为方程源项,  $S$  为几何源项(柱坐标情况存在, 笛卡尔坐标下为 0); 对于两种物质情况下, 各矢量可以写成如下形式:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u} &= \begin{Bmatrix} z_1 \rho_1 \\ z_2 \rho_2 \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \\ z_1 \\ z_2 \rho_2 \lambda \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{Bmatrix} z_1 \rho_1 u \\ z_2 \rho_2 u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ u(\rho E + p) \\ z_1 u \\ z_2 \rho_2 \lambda u \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{g} = \begin{Bmatrix} z_1 \rho_1 v \\ z_2 \rho_2 v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ v(\rho E + p) \\ z_1 v \\ z_2 \rho_2 \lambda v \end{Bmatrix}, \\
 \mathbf{h} &= \begin{Bmatrix} z_1 \rho_1 w \\ z_2 \rho_2 w \\ \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ w(\rho E + p) \\ z_1 w \\ z_2 \rho_2 \lambda w \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ z_1 \nabla \cdot (u, v, w) \\ K \end{Bmatrix}, \\
 \mathbf{S} &= \begin{Bmatrix} z_1 \rho_1 \\ z_2 \rho_2 \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E + p \\ z_2 \rho_2 \lambda \\ 0 \end{Bmatrix}
 \end{aligned}$$

式中,  $\rho$  为表示密度,  $(u, v, w)$  为速度,  $p$  为压力,  $E$  为单位质量的总能, 定义为  $E = e + 1/2(u^2 + v^2 + w^2)$ ,  $e$  为单位质量的内能;  $\lambda$  为反应物质量分数,  $K$  反应源项,  $z$  表示物质的体积分数, 下标 1 和 2 对应物质 1 和 2, 且满足  $z_1 + z_2 = 1$ ; 不同的物质界面处满足温度和压力平衡, 当考虑到物质 2 由反应物  $\alpha$  到产物  $\beta$  的过程, 总体的比内能和密度满足如下条件:

$$\rho e = z_1 \rho_1 e_1 + z_2 \rho_2 e_2 = z_1 \rho_1 e_1 + z_2 \rho_2 (\lambda e_\alpha + (1 - \lambda) e_\beta) \quad (2)$$

$$\rho = z_1 \rho_1 + z_2 \rho_2, \quad \frac{1}{\rho_2} = \frac{\lambda}{\rho_\alpha} + \frac{1 - \lambda}{\rho_\beta} \quad (3)$$

控制方程(1)包含了质量分数和体积分数, 可以描述多种物质的动力学响应过程; 当忽略物质的化学反应过程, 该可退化为描述多介质可压缩流体的五方程模型; 当仅考虑炸药的爆轰过程, 以上方程可退化为反应流欧拉方程。

## 2.2 状态方程

对于凝聚相炸药, 各种物质的状态方程统一写成 Mie-Grüneisen 的形式<sup>[8]</sup>:

$$p(\rho, e) = p_{\text{ref}}(\rho) + \Gamma(\rho) \rho (e_{\text{ref}}(\rho)) \quad (4)$$

式中,  $\Gamma$  为材料参数,  $p_{\text{ref}}$  和  $e_{\text{ref}}$  分别对应材料在等熵曲线或雨贡扭曲线上的压力和内能, 利用状态方程可以得到温度:

$$T = \frac{p - p_{\text{ref}}}{\rho \Gamma C_v} \quad (5)$$

采用 JWL 状态方程描述<sup>[9]</sup> 述高压状态下固体炸药和气体爆轰产物的状态, 写成 Mie-Grüneisen 形式为:

$$p_{\text{ref}}(\rho) = A \exp\left(\frac{-R_1 \rho_0}{\rho}\right) + B \exp\left(\frac{-R_2 \rho_0}{\rho}\right) \quad (6)$$

$$e_{\text{ref}}(\rho) = \frac{A}{\rho_0 R_1} \exp\left(\frac{-R_1 \rho_0}{\rho}\right) + \frac{B}{\rho_0 R_2} \exp\left(\frac{-R_2 \rho_0}{\rho}\right) \quad (7)$$

$$\Gamma(\rho) = \Gamma_0 \quad (8)$$

在炸药反应过程, 参考内能需要考虑反应过程中的能量释放  $Q$ , 针对固体炸药参考内能变为  $e_{\text{ref}} - Q$ 。

## 2.3 炸药反应模型

凝聚相炸药爆轰的化学反应过程非常复杂, 本研究采用 Lee 和 Tarver 提出的点火和成长反应率模型<sup>[10]</sup>, 该模型包含了两项反应模型和三项反应模型。两项反应模型形式为:

$$dF/dt = -K = I(1-F)^a (\rho/\rho_0 - 1)^x + G(1-\lambda)^b \lambda^c p^y \quad (9)$$

式中,  $F = 1 - \lambda$  为产物的质量分数,  $I, G, b, c, d, x, y$  为炸药相关常数。该模型包含点火项和增长项, 可以描述持续脉冲冲击起爆的过程, 但该模型在描述短脉冲的冲击起爆时与实验相差较大, 因此又将以上模型修改为三项式, 形式为:

$$\begin{aligned}
 dF/dt &= I(1-F)^b (\rho/\rho_0 - 1 - a)^x H(F_{IG\text{max}} - F) + \\
 &G_1(1-F)^c F^d p^y H(F_{G1\text{max}} - F) + \\
 &G_2(1-F)^e F^g p^z H(F - F_{G2\text{max}}) \quad (10)
 \end{aligned}$$

式中,  $H$  为 Heaviside 函数,  $I, G_1, G_2, a, b, c, d, e, g, x, y$  和  $z$  为炸药相关常数。  $F_{IG\text{max}}, F_{G1\text{max}}, F_{G2\text{max}}$  为常数, 该模型可以描述短脉冲冲击起爆过程中的热点成核、成长以及汇合三个阶段。

## 3 数值计算方法

对于方程的离散采用基于非结构网格有限体积方法, 守恒型方程(1)中除体积分数控制方程都具有双曲方程的性质, 因此数值计算可以在空间上采用基于 HLLC 黎曼求解器的 Godunov 格式, 并利用 MUSCL-

Hancock 格式扩展到二阶精度, 时间层上采用二阶精度的 Runge-Kutta 方法<sup>[11]</sup>。

体积分数可以描述炸药的外部介质的响应过程, 暂不属于本研究讨论范围。针对炸药的反应过程, 化学反应区内压力、温度等物理量的准确计算是爆轰模拟的关键。由于该区域内同时存在未反应固体炸药 (s) 和气体爆轰产物 (g), 当满足  $T = T_s(\nu_s, e_s) = T_g(\nu_g, e_g)$  和  $p = p_s(\nu_s, e_s) = p_g(\nu_g, e_g)$  时,  $\nu$  为比容, 热力学平衡状态要求下式收敛:

$$\begin{cases} p_g - p_s \\ T_g - T_s \end{cases} = \begin{bmatrix} \frac{\partial p_s}{\partial \nu_s} - \frac{\partial p_g}{\partial \nu_s} & \frac{\partial p_s}{\partial e_s} - \frac{\partial p_g}{\partial e_s} \\ \frac{\partial T_s}{\partial \nu_s} - \frac{\partial T_g}{\partial \nu_s} & \frac{\partial T_s}{\partial e_s} - \frac{\partial T_g}{\partial e_s} \end{bmatrix} \begin{cases} \delta \nu_s \\ \delta e_s \end{cases} \quad (11)$$

计算中采用 Newton-Raphson 方法<sup>[12]</sup> 迭代实现平衡条件。

另外, 考虑到大规模爆轰问题由于计算模型复杂所导致的运行效率问题, 以上数值算法基于 JAUMIN 框架开发, 并集成了高效非结构网格数据结构、索引算

法和动态负载平衡, 可以实现数万核的并行计算。

#### 4 模型和方法验证

应用以上物理模型和数值方法模拟 PBX9404 炸药的爆轰, 计算模型的尺寸取为  $[0, 20] \text{ mm} \times [0, 4] \text{ mm}$ 。初始时刻在炸药左端 2 mm 内以 CJ 条件起爆炸药, 右端为未反应炸药, 初始条件如表 1。左右边界为连续边界条件, 固体炸药和反应产物均采用 JWL 状态方程, 化学反应率模型采用两项点火增长反应率模型, 参数如表 2。

表 1 PBX9404 初始条件设置

Table 1 Setting of initial conditions for PBX9404

physical variable	$\rho$ / $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	$u$ / $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	$E$ / $10^6 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$	$p$ /GPa
C-J	2488	2290	10.767	37
unreactants	1842	0.0	5.537	$10^{-4}$

Note:  $\rho$  is the density;  $u$  is the velocity;  $E$  is the total energy;  $p$  is the pressure.

表 2 PBX9404 状态方程和反应率模型参数

Table 2 Equation of state and reaction rate model parameters for PBX9404

JWL parameters	$\Gamma_0$	$A$ /GPa	$B$ /GPa	$R_1$	$R_2$	$C_v$ /GPa $\cdot \text{K}^{-1}$	$Q$ / $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$
reactants	0.38	853.4	18.02	7.8	3.9	$2.505 \times 10^{-3}$	-
products	0.8578	6969	-172.7	4.6	1.3	$1.0 \times 10^{-3}$	$5.537 \times 10^6$
reaction parameters	$I$ / $\mu\text{s}^{-1}$	$G$ / $\mu\text{s}^{-1} \cdot (10^2 \text{ GPa})^{-\gamma}$	$a$	$b$	$c$	$x$	$y$
PBX9404	44	200	2/9	2/9	2/3	4	1.6

Note:  $\Gamma_0, A, B, R_1, R_2, C_v$  and  $Q$  are parameters of JWL equation of state;  $I, G, b, c, d, x$  and  $y$  are parameters of reaction rate.

数值计算可以采用三角形图 1a、四边形网格图 1b, 以四核并行为例, 不同颜色代表对应着并行计算过程的处理器不同, 说明数值程序能够实现多核并行。为了测试网格收敛性情况, 网格取为四边形网格, 划分方式分别为  $40 \text{ cells} \cdot \text{mm}^{-1}$  和  $80 \text{ cells} \cdot \text{mm}^{-1}$ 。

图 2 给出了网格数为  $40 \text{ cells} \cdot \text{mm}^{-1}$  的压力分布随时间的变化, 由图 2 可以看出, 当时间大于  $0.50 \mu\text{s}$  时爆轰趋于稳定, 图 3 显示在  $1.20 \mu\text{s}$  时刻不同网格分辨率下的压力分布, 从图 3 中可以看出网格分辨率为  $40 \text{ cells} \cdot \text{mm}^{-1}$  和  $80 \text{ cells} \cdot \text{mm}^{-1}$  两种情况的压力分布基本一致, 说明采用以上模型和方法计算凝聚相炸药爆轰具有较好的网格的收敛性。

表 3 给出了在  $40 \text{ cells} \cdot \text{mm}^{-1}$  划分条件下该炸药 Von Neumann 峰值的计算结果与实验结果, 由表 3 可见, 计算结果与实验值吻合较好, 因此, 本研究所采用

的模型和方法能够正确的预测凝聚炸药的起爆及爆轰波传播的关键特征, 证明了物理模型和计算方法的合理性。

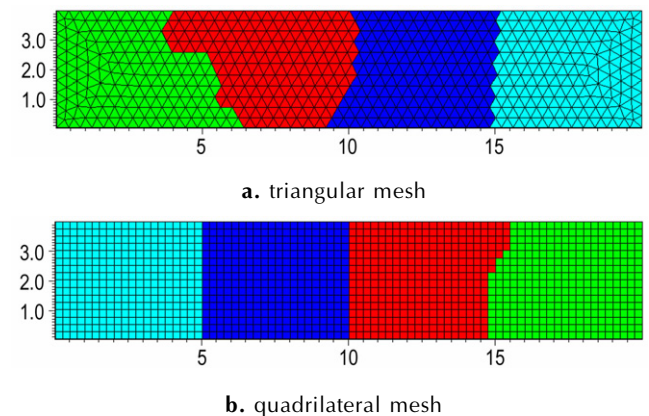


图 1 不同网格单元并行分区

Fig.1 Parallel partition of different mesh units

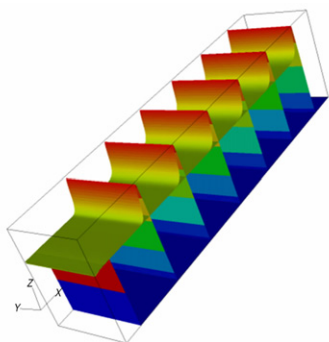


图2 爆轰波在不同时刻的压力分布( $t=0 \mu\text{s}$  到  $1.8 \mu\text{s}$ ,  $\Delta t=0.3 \mu\text{s}$ )

Fig.2 The pressure distribution of detonation wave at different time( $t=0 \mu\text{s}$  to  $1.8 \mu\text{s}$ ,  $\Delta t= 0.3 \mu\text{s}$ )

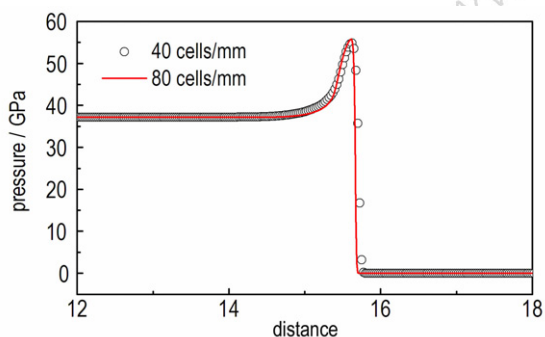


图3  $t=1.2 \mu\text{s}$  时不同网格划分下的压力曲线

Fig.3 The pressure curves under different mesh pertition at  $t=1.2 \mu\text{s}$

表3 PBX9404 Von Neumann 峰值计算结果与实验结果的误差

Table 3 The errors between computational results and experimental ones of the Von Neumann value of PBX9404

	$\rho$ /kg · m <sup>-3</sup>	$u$ /m · s <sup>-1</sup>	$p$ /GPa	$D$ /m · s <sup>-1</sup>
experiment	3.041	3.47	56.3	8.8
computation	3.007	3.42	55.6	9.14
error/%	1.12	1.44	1.24	3.90

Note:  $\rho$  is the density;  $u$  is the velocity;  $p$  is the pressure,  $D$  is the detonation velocity.

### 5 炸药拐角爆轰研究

炸药选取为 PBX-9404, 具体参数见表 1 和表 2。计算模型的尺寸取为  $[0, 12] \text{ mm} \times [8, 12] \text{ mm}$  的直筒和不同的拐角区域, 直筒左端用 CJ 状态起爆作为初始条件, 爆轰波达到拐角位置时的时间为  $0.40 \mu\text{s}$ , 已经成长为稳定爆轰波。左端为入流边界条件, 右端为出流边界条件, 其余边界均为固壁边界, 计算中采用四

边形网格, 网格分辨率为  $50 \text{ cells} \cdot \text{mm}^{-1}$ 。

#### 5.1 拐角波阵面研究

图 4 为  $90^\circ$  和  $135^\circ$  拐角绕射爆轰波密度和速度分布, 从图 4 可以看出, 稳定的平面爆轰波由于受到拐角影响发生衍射, 衍射产生的稀疏波引起密度降低, 波阵面变的弯曲, 对比不同拐角发现, 拐角较大时对于爆轰波的稀疏作用更明显。绕射后的稀疏波可以根据激波的衍射理论得到, 已知激波后声速  $c$ 、粒子速度  $u$  和未被扰动的激波速度  $D$ , 如图 5, 由图 5 可以得到稀疏角  $\alpha$  的关系满足:

$$\tan \alpha = \frac{v}{D} = \frac{\sqrt{c^2 - (D-u)^2}}{D}$$

由  $\alpha$  可以得到侧向冲击波的传播距离和时间, 对于爆轰波来说, 假设满足 C-J 爆轰, 根据激波传播的自相似性, 可以采用以上理论来追踪拐角爆轰波阵面; 当拐角为任意角度  $\theta$ , 任意点流场速度为  $u$  时, 可以得到波阵面距离函数  $\varphi(x, y)$  满足:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \Big|_{\nabla \varphi} = 0$$

结合数值模拟结果可以得到波阵面形状(曲率、法向)和冲击波强度的关系。

图 6 为拐角沿内壁面  $3 \text{ mm}$  距离内密度、压力和量分数在不同时刻的分布曲线。从图 6 可以看出  $0.50 \mu\text{s}$  时角点附近压力约为  $10 \text{ GPa}$ , 密度为  $2.0 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ,

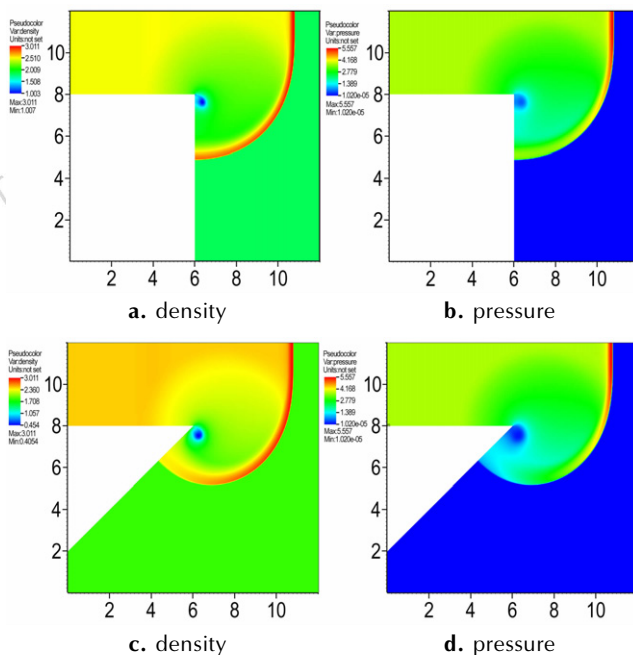


图4  $90^\circ$  和  $135^\circ$  拐角绕射爆轰波密度和压力分布

Fig.4 The distribution of density and pressure for diffraction detonation wave around the  $90^\circ$  and  $135^\circ$  corner



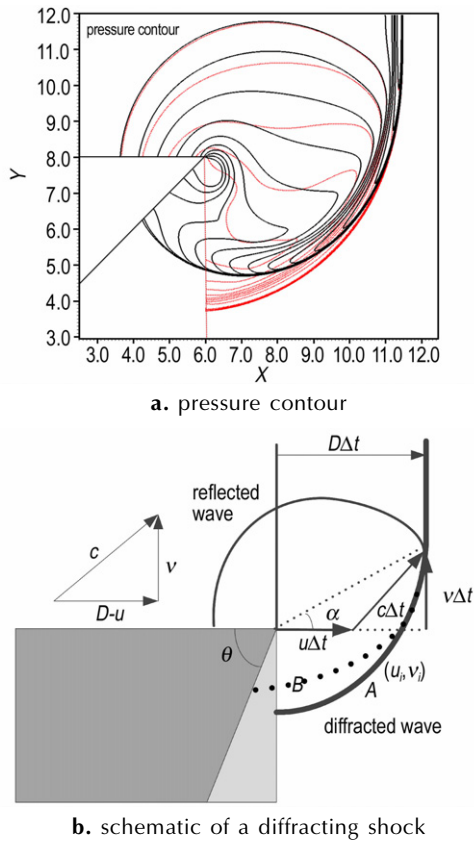


图 5 90°和 135°拐角绕射压力等高线对比和爆轰波衍射示意图  
 Fig.5 Comparison of diffraction pressure contour and the diffraction schematic of detonation wave at the 90° and 135° corner

可以认为属于熄爆区域,形成临时的“死区”,此时前导冲击波与化学反应解耦,冲击波能量主要用于波的膨胀,因此引起后面化学反应变慢且反应区宽度变宽,而随着前导冲击波远离拐角,未反应炸药又重新开始反应,爆轰波阵面沿内壁面向下传播并不断成长为稳定爆轰波。

90°拐角情况下,“死区”内的炸药又重新加速反应,内壁面附近发生二次起爆,将拐角增大至 120°、135°和 153°,图 7 给出了不同时刻的压力分布,由图 7 可以发现三种角度下拐角附近首先压力持续下降,135°情况下 0.8 μs 时拐角压力为 1 GPa,说明拐角角度的增大对爆轰波阵面产生了更大的稀疏作用,且拐角下游区域的“死区”区域随着角度增大而变大;而随着时间的演化,熄爆区域压力最终又重新升高,说明在拐角扩大到 153°时仍没有形成永久的“死区”,这与 Banks<sup>[6]</sup>关于 LX-17 炸药的结论一致。

图 8a 出了 PBX9404 炸药在 90°和 135°拐角速度对比,由图 8a 可知,135°拐角附近区域发生明显的“涡流”,“涡流”周围的粒子围绕中心沿顺时针运动,

中心处的粒子速度接近 0,因此可以说明拐角较大时前导冲击波的能量主要用于涡流的运动,因此化学反应将变慢,且形成低压低密度区域。

图 8b 给出了 90°和 135°拐角爆轰产物质量分数对比,其中红线代表前导冲击波波阵面,由图 8b 可知,1.0 μs 时,135°拐角情况下前导冲击波与化学反应完全解耦,爆轰熄爆。图 9 为拐角内壁面区域的压力和质分数随时间变化的曲线,可以发现 0.55 μs 时拐角区域的炸药几乎没有反应,随着侧向冲击波的传播,到 1.0 μs 炸药开始缓慢反应,但反应区域已完全滞后于压力波波阵面;从 1.075 μs 到 1.25 μs,炸药反应开始加速。

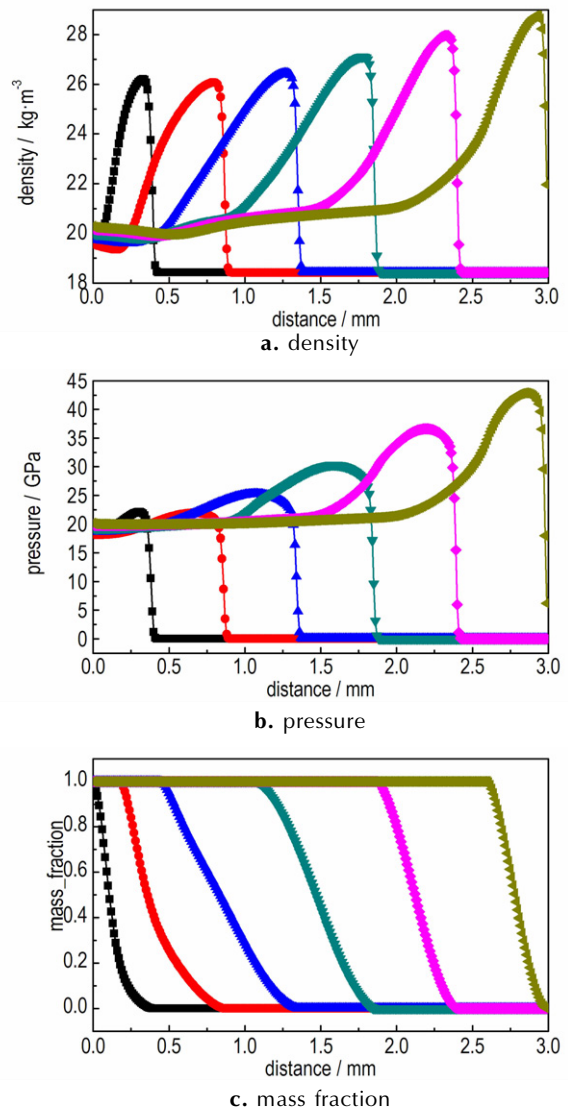
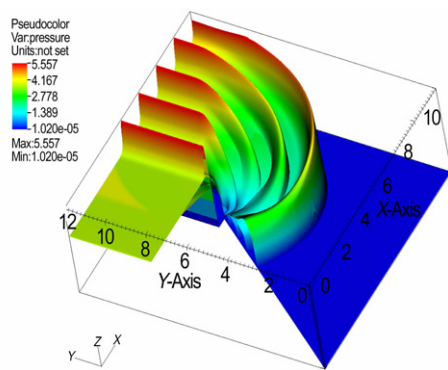
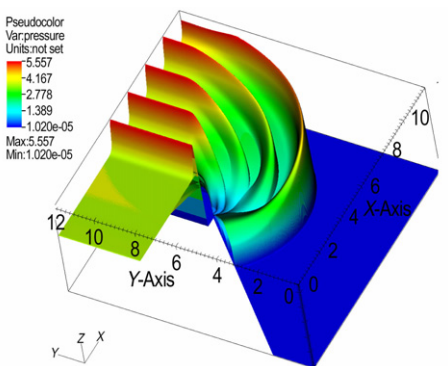


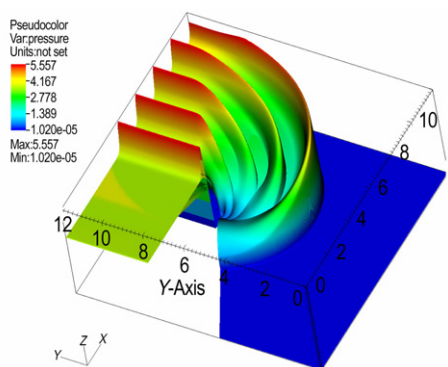
图 6 90°拐角爆轰时物理量随时间变化曲线 ( $t=0.50 \mu\text{s}$  到  $0.75 \mu\text{s}$ ,  $\Delta t=0.05 \mu\text{s}$ )  
 Fig.6 The change curves of physical quantity with time when detonation at the 90° corner ( $t=0.50 \mu\text{s}$  to  $0.75 \mu\text{s}$ ,  $\Delta t=0.05 \mu\text{s}$ )



a. 120°



b. 135°

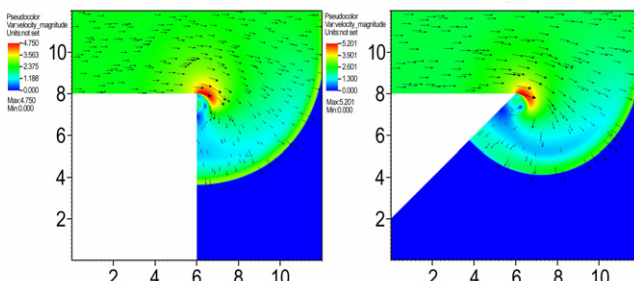


c. 153°

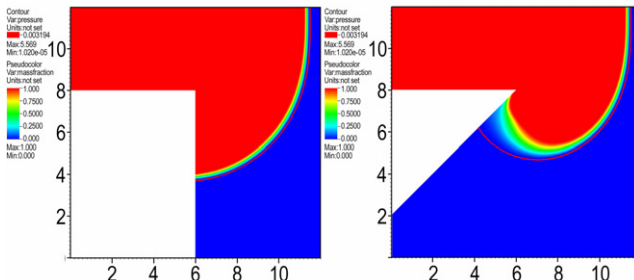
图7 拐角绕射时压力变化( $t=0.45 \mu\text{s}$  到  $1.15 \mu\text{s}$ ,  $\Delta t=0.175 \mu\text{s}$ )  
Fig.7 The pressure change at corners diffraction ( $t=0.45 \mu\text{s}$  to  $1.15 \mu\text{s}$ ,  $\Delta t=0.175 \mu\text{s}$ )

从质量分数曲线(图9b)可以发现,产物质量分数在1.5 mm到2 mm最大,说明炸药反应是在波阵面后的未反应炸药的局部开始反应,并且反应是向两个方向进行,这就是炸药爆轰的“回爆”现象,沿着冲击波方向反应能量会加速爆轰反应,趋向于稳定爆轰,而与冲击反向的会使压力出现扰动,因此可以得到“死区”内炸药重新起爆的需要回爆波强度小于一定的诱导时间和诱导距离。Hill 基于改进的圆筒实验<sup>[5]</sup>

研究“死区”效应时,定义了诱导时间,结合能量释放时间来研究二次起爆过程,基于该实验研究,我们同样



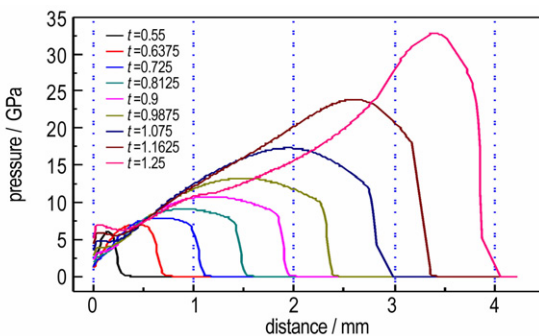
a. velocity



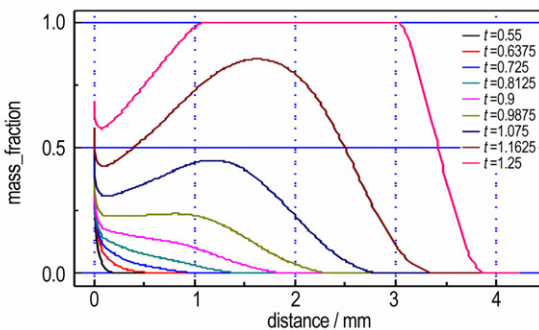
b. mass fraction

图8 90°拐角和135°拐角绕射时速度和产物质量分数对比 ( $t=1.1 \mu\text{s}$ )

Fig.8 Comparison of the velocity and the mass fraction of products when diffraction at 90° corner and 135° corner at  $t=1.1 \mu\text{s}$



a. pressure



b. mass fraction

图9 135°拐角爆轰时压力和质量分数随时间变化曲线  
Fig.9 The change curves of pressure and mass fraction with time when detonation at 135° corner

定义诱导时间  $\Delta t_i$ , 诱导时间为产物质量分数从 0.5 到 1 的所需时间, 而对应的距离为诱导距离  $\Delta l_i$ , 对于  $135^\circ$  拐角的 PBX9404 炸药, 从图 9 中可以发现, 靠近壁面的诱导时间约为  $0.2 \mu\text{s}$ , 诱导距离约为  $2 \text{ mm}$ , 与 Hill<sup>[5]</sup> 的实验可以得到一致的结论。

## 6 结 论

构建了多介质混合爆轰模型, 采用点火增长模型描述炸药起爆、爆轰反应过程, 结合基于非结构网格的有限体积方法和爆轰反应区平衡迭代算法实现凝聚相炸药爆轰的数值模拟并验证了物理模型、数值方法和软件模块的正确性。基于数值模拟重点讨论和分析了不同拐角下的爆轰波的传播过程, 得到以下结论:

(1) 凝聚相炸药拐角爆轰过程中的拐角越大, 爆轰波衍射作用越明显, 衍射波波阵面与当地流场满足一定的关系。

(2) 拐角爆轰“死区”的形成原因是拐角的存在引入稀疏波并形成“涡流”, 导致化学反应与侧向爆轰波解耦, 拐角“死区”范围随着拐角增大而扩大。

(3) 定义了拐角爆轰过程的临界诱导距离, 死区内炸药能否重新起爆的关键是回爆波引起的炸药快速反应时间是否大于炸药的临界诱导时间, 如果回爆波作用时间大于拐角炸药作用时间, 则炸药能快速重新起爆。

此外, 本研究采用的点火增长模型是永久死区未能形成的原因之一, 后续工作会重点考虑拐角的作用, 研究不同反应模型对于死区的影响。

## 参考文献:

- [1] Tarver C M, Hallquist J O. Modeling Two-Dimensional Shock Initiation and Detonation Wave Phenomena in PBX 9404 and LX-17[C]// In: Short J M, Ed. The Proceedings of The 7th Symposium (International) on Detonation Annapolis MD, 1981. White Oak MD: Naval Weapons Center, 1981.
- [2] Tang P K, Forest C. Shock wave initiation of heterogeneous reactive solids[J]. *Journal of Applied Physics*, 1985, 57: 4323.
- [3] Jia Quansheng, Liu Jupeng, Feng Changgen. Numerical Modeling for Turning Corner Effect of Detonation Wave and Convergent Wave Effect[C]// In: Zhang Guanren, Huang Shihui Ed. The Proceedings of The 2nd International Symposium on Intense Dynamic Loading and Its Effect. Chengdu China: Sichuan University Press, 1992, 137.
- [4] 于川, 赵同虎, 孙承纬. 四种炸药爆轰波绕射数值模拟研究[J]. *爆炸与冲击*, 1998, 18(1): 35-41. YU Cuan, ZHAO Tong-hu, SUN Cheng-wei. Numerical simulation on diffraction of detonation waves in four explosives[J]. *Explosion and Shock Waves*, 1998, 18(1): 35-41.
- [5] Hill L G. Is the detonation “Dead Zone” really dead? [C]// Proceedings of the Combustion Institute, 2015, 35: 2041-2049.
- [6] Banks J W, Henshaw W D, Schwendeman, et al. A study of detonation propagation and diffraction with compliant confinement[J]. *Combustion Theory and Modeling*, 2008, 12(4): 769-808.
- [7] Banks J W, Schwendeman D W, Kapila A K, et al. A high-resolution Godunov method for compressible multi-material flow on overlapping grids[J]. *Journal of Computational Physics*, 2007, 223: 262-297.
- [8] Tarver C, Urtiew P. Theory and modeling of liquid explosive detonation[J]. *J Energ Mater*, 2010, 28(4): 299-317.
- [9] Michael L, Nikiforakis N. A hybrid formulation for the numerical simulation of condensed phase explosives[J]. *Journal of Computational Physics*, 2016, 316: 193-217.
- [10] Lee E, Tarver C. Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives[J]. *Phys Fluids*, 1980, 23: 2362.
- [11] Toro E. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction[M]. Springer, 2009.
- [12] Press W, S Teukolsky, Vetterling W et al. Numerical recipes, in: The Art of Scientific Computing[M]. 3rd edition, Cambridge University Press, 2007.

## Numerical Simulations of the Corner Detonation of Condensed Phase Explosives

WANG Xing<sup>1</sup>, JIANG Sheng-li<sup>1</sup>, ZHAO Han-yue<sup>1</sup>, YU Yi<sup>1,2</sup>, ZHANG Lei<sup>1,2</sup>, CHEN Jun<sup>1,2</sup>

(1. CAEP Software Center for High Performance Numerical Simulation, Beijing 100088, China; 2. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

**Abstract:** The hybrid detonation formulation of three-dimensional condensed phase explosives is presented based on the multi-phase compressible fluid equation and the reaction rate equation. The iteration method of thermodynamic equilibrium for the multi-phase detonation mixed reaction zone is built and an efficient detonation parallel software is developed. The feasibility of the physical model, the numerical method and the program module are verified by comparative experiments. We focus on the wave front structure, the coupling of flow fields and chemical reactions and the secondary initiation mechanism of condensed phase explosives by numerical simulations of the detonation process at various corners. The numerical results show that the diffraction area of a corner of  $135^\circ$  is larger than that of  $90^\circ$  of PBX9404 explosive, and the wave front structure is affected by the local flow field velocity. The temporary “death zone” is formed because the chemical reactions are decoupled from the leading shock wave when the detonation wave passes the corner. As the corner angle increases, the dead zone of the corner is expanded. The key of secondary initiation in the dead zone is that the acting time of back-detonation wave should be longer than the critical induction time of explosives in the corner zone.

**Key words:** condensed phase explosives; corner detonation; numerical simulation

**CLC number:** TJ55; O382.+1

**Document code:** A

**DOI:** 10.11943/j.issn.1006-9941.2018.01.012