

文章编号: 1006-9941(2006)03-0195-05

用一种改进的 Euler 方法模拟凝聚炸药的爆轰

张波¹, 于明²

(1. 96411 部队 25 分队, 陕西 宝鸡 721006;

2. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

摘要: 建立了一种改进的 Euler 方法来数值模拟凝聚炸药的爆轰, 化学反应率采用 Lee-Tarver 的点火成长模型。由该化学反应模型的假设推导出物质组分的能量方程, 这样可以避免通过定义混合物质的状态方程带来的非物理振荡。Euler 方程被用来描述混合物质的流动, 每种物质组分的物理参量, 如组分质量、组分体积份额以及组分总能量等, 通过一套附加的方程来描述, 并且混合物压力方程也被耦合起来。对所获得的控制方程使用高分辨率、高阶精度的有限体积法离散求解。从典型爆轰算例来看, 该方法能够正确预测凝聚炸药爆轰的起爆及传播过程中的关键特征, 如 Von Neumann 尖峰和化学反应区等。

关键词: 爆炸力学; 凝聚炸药; 爆轰; 点火成长模型; 组分能量方程; Euler 方程

中图分类号: TJ55; O389

文献标识码: A

1 引言

数值模拟凝聚炸药的爆轰起爆和传播过程是爆轰研究的一个重要手段。在爆轰的数值模拟中, 建立什么样的理论方法是至关重要的。本文把一个唯象的化学反应速率-点火成长模型^[1]运用到改进的 Euler 型的流体动力学中, 对未反应炸药与反应产物均使用传统的 JWL (Jones-Wilkins-Lee) 状态方程, 建立了一个用数值模拟凝聚炸药爆轰的理论方法, 并对所获得的控制方程使用高分辨率、高阶精度的有限体积法离散求解。

2 混合物物理量的定义

考虑一个控制体, 包含有未反应炸药与反应产物这两种物质, 分别被标记为组分 s 和 g, 并且对每种物质组分有密度 ρ_s 和 ρ_g 、内能 e_s 和 e_g 、总能量 E_s 和 E_g 、分压 p_s 和 p_g 及体积份额 f_s 和 f_g 。对混合物质的密度 ρ 、内能 e 、压力 p , 有如下定义:

$$\begin{aligned}\rho &= \rho_s f_s + \rho_g f_g, \\ \rho e &= \rho_s e_s f_s + \rho_g e_g f_g, \\ p &= p_s + p_g, \text{ 且 } f_g = 1 - f_s\end{aligned}$$

如果考虑到控制体内两种物质组分有相同的速度, 则对混合物质的总能量 E 有定义:

$$\rho E = \rho_s E_s f_s + \rho_g E_g f_g$$

这里假设控制体内两种物质组分独立共存, 满足动力

学平衡条件, 因此可以认为每个控制体被分成了两个区域, 每个区域只包含一种物质组分。这样, 包含每种物质组分的区域在物质接触界面处压力应当保持连续并且相互相等。也就是说, 下面的表达式成立:

$$p_s = p f_s, p_g = p f_g$$

对未反应炸药与反应产物均使用 JWL 状态方程^[2], 为:

$$\begin{aligned}p &= A_l \left(1 - \frac{\omega_l \rho_l}{R_{1l} \rho_0} \right) \exp \left(- \frac{R_{1l} \rho_0}{\rho_l} \right) + \\ &B_l \left(1 - \frac{\omega_l \rho_l}{R_{2l} \rho_0} \right) \exp \left(- \frac{R_{2l} \rho_0}{\rho_l} \right) + \omega_l \rho_l e_l, \quad l = s, g \quad (1)\end{aligned}$$

这里 $A_l, B_l, \omega_l, R_{1l}, R_{2l}, \rho_0$ 均为与炸药状态有关的常数。

3 爆轰控制方程

不考虑各种耗散因素及外力做功情况, 则可压缩理想流动的混合物质的 Euler 方程和未反应炸药组分的质量守恒方程, 有如下表达式:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} &= 0 \\ \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u} + p) &= 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E + p) \vec{u} &= 0 \\ \frac{\partial \rho_s f_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s f_s \vec{u}) &= R_s \end{aligned} \right. \quad (2)$$

这里 R_s 是未反应炸药的化学反应率。该函数的表达式为:

$$R_s = -\rho I F^x (\rho_s / \rho_0 - 1)^r - \rho G F^x (1 - F)^y p^z$$

收稿日期: 2005-04-08; 修回日期: 2005-10-28

作者简介: 张波 (1976 -), 男, 硕士, 从事火工品和炸药部件研究。

e-mail: zhangbo3721@163.com

这里 F 为未反应炸药的质量分数, 定义为 $F = \rho f_s / \rho$, 其中 I, G, x, y, z, r 均为与炸药种类相关的常数^[3]。

由式(1)、JWL 状态方程, 并假设控制体的两个区域内的物质组分是以等熵过程混合, 可得到:

$$\frac{dp}{dt} + \left(1 / \sum_{l=s,g} \frac{f_l}{a_l p + b_l + c_l} \right) \nabla \cdot \vec{u} = w \quad (3)$$

$$w = \left(\sum_{l=s,g} \frac{R_l}{\rho_l} \right) / \left(\sum_{l=s,g} \frac{f_l}{a_l p + b_l + c_l} \right),$$

$$b_l = A_l [R_{1l} \rho_0 / \rho_l - (1 + \omega_l)] \exp(-R_{1l} \rho_0 / \rho_l),$$

$$a_l = 1 + \omega_l, c_l = B_l [R_{2l} \rho_0 / \rho_l - (1 + \omega_l)] \exp(-R_{2l} \rho_0 / \rho_l),$$

$$\text{且 } R_g = -R_s$$

$$\frac{df_l}{dt} + \left(f_l - \frac{f_l}{a_l p + b_l + c_l} / \sum_{l=s,g} \frac{f_l}{a_l p + b_l + c_l} \right) \nabla \cdot \vec{u} =$$

$$\frac{R_l}{\rho_l} - w \frac{f_l}{a_l p + b_l + c_l}, \quad l = s, g \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho_s f_s E_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s f_s E_s \vec{u}) + \frac{\rho_s f_s \vec{u}}{\rho} \cdot \nabla p +$$

$$\left(\frac{p f_s}{a_s p + b_s + c_s} / \sum_{l=s,g} \frac{f_l}{a_l p + b_l + c_l} \right) \nabla \cdot \vec{u} =$$

$$R_s E_s + w \frac{p f_s}{a_s p + b_s + c_s} \quad (5)$$

综合上述推导过程, 本文所获得的数值模拟凝聚炸药爆轰过程的控制方程由式(2)、式(3)、式(4)及式(5)组成。该控制方程在二维坐标系下可以写成如下矢量形式:

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + A(\vec{q}) \frac{\partial \vec{q}}{\partial x} + B(\vec{q}) \frac{\partial \vec{q}}{\partial y} = S(\vec{q}) \quad (6)$$

这里状态变量, $\vec{q} = [\rho, \rho u, \rho v, \rho E, \rho_s f_s, \rho_s f_s E_s, f_s, p]^T$,

Jacobi 矩阵 $A(\vec{q}) =$

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -u^2 & 2u & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -uw & v & u & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -Hu & H & 0 & u & 0 & 0 & 0 & u \\ -\rho_s f_s u / \rho & \rho_s f_s / \rho & 0 & 0 & u & 0 & 0 & 0 \\ -(\rho_s f_s E_s + \alpha) u / \rho & (\rho_s f_s E_s + \alpha) / \rho & 0 & 0 & 0 & u & 0 & \rho_s f_s u / \rho \\ -\beta u / \rho & \beta / \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & u & 0 \\ -\chi u / \rho & \chi / \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$\text{源项 } S(\vec{q}) = [0, 0, 0, 0, R_s, R_s \frac{\rho_s f_s E_s}{\rho f_s} + w \frac{p f_s}{a_s p + b_s + c_s},$$

$$R_s \frac{f_s}{\rho f_s} - w \frac{f_s}{a_s p + b_s + c_s}, w]^T \quad (8)$$

Jacobi 矩阵 $B(\vec{q})$ 的表达形式与 $A(\vec{q})$ 类似, 只要交换 u 和 v 的位置, 且 $H = E + p / \rho$,

$$\alpha = \frac{p f_s}{a_s p + b_s + c_s} / \sum_{l=s,g} \frac{f_l}{a_l p + b_l + c_l},$$

$$\beta = f_s - \frac{f_s}{a_s p + b_s + c_s} / \sum_{l=s,g} \frac{f_l}{a_l p + b_l + c_l},$$

$$\chi = 1 / \sum_{l=s,g} \frac{f_l}{a_l p + b_l + c_l}, u \text{ 和 } v \text{ 为速度分量。}$$

4 控制方程的数值方法

考察式(7)中 Jacobi 矩阵的 8 个特征值和特征向量如下。

特征值为 $\lambda_1 = u - c, \lambda_{2,\dots,7} = u, \lambda_8 = u + c$, 声速 $c = \sqrt{\chi / \rho}$ 。

右特征向量为: $\vec{r}_1(\vec{q}) \cdots \vec{r}_8(\vec{q})$, 相应的左特征向量为: $\vec{l}_1(\vec{q}) \cdots \vec{l}_8(\vec{q})$ 。

Strang 分裂方法被用来离散求解这个带源项的非守恒双曲律(6)。在其双曲律推进时间步中, 在均匀网格的有限体积近似下, 一个二阶精度的且具有波传播特征的 Godunov 型格式可以写成^[4]:

$$\begin{aligned} \vec{q}_{i,j}^{n+1} = & \vec{q}_{i,j}^n - (\Delta t / \Delta x) (A^+ \Delta t \vec{q}_{i,j}^n + A^- \Delta t \vec{q}_{i+1,j}^n) - \\ & (\Delta t / \Delta y) (B^+ \Delta t \vec{q}_{i,j}^n + B^- \Delta t \vec{q}_{i+1,j}^n) - \\ & (\Delta t / \Delta x) (\vec{F}_{i+1,j}^n - \vec{F}_{i,j}^n) - \\ & (\Delta t / \Delta y) (\vec{G}_{i+1,j}^n - \vec{G}_{i,j}^n) \end{aligned} \quad (9)$$

$$(A^+ \Delta \vec{q})_{i,j} = (A^+ \Delta \vec{q})_{i,j} \mp$$

$$\sum_{k=1}^8 [|\lambda_k| (1 - (\Delta t / \Delta x) |\lambda_k|) \vec{\alpha}_k \vec{r}_k]_{i,j} \quad (10)$$

$$\vec{F}_{i,j} = \vec{F}_{i,j} +$$

$$\frac{1}{2} \sum_{k=1}^8 [|\lambda_k| (1 - (\Delta t / \Delta x) |\lambda_k|) \vec{\alpha}_k \vec{r}_k]_{i,j} \quad (11)$$

这里 $A^+ = R A^* L$, L 和 R 是 Jacobi 矩阵的左右特征向量构成的矩阵, A^* 是 A 的非负与非正特征值构成的对角矩阵, 且 $\Delta \vec{q}_{i,j} = \vec{q}_{i,j} - \vec{q}_{i-1,j}$, $\vec{\alpha}_k(\theta) L \Delta \vec{q}$, 其中 $\phi(\theta)$ 是限制函数, $\vec{G}_{i,j}$ 为横向通量修正。 B^* 有与之类似的性质。

5 典型算例

5.1 一维平面爆轰问题

考查凝聚炸药 PBX9404, 其 Von Neumann 尖峰压力的理论值为 $p_{NS} = 56.3$ GPa。

考虑炸药长度为 4.0 cm, 以 CJ 条件起爆, 在如下几种网格分点条件下: 5, 30, 100 grids · mm⁻¹, 获得爆轰波传播过程中几个典型时刻的压力分布, 如图 1 ~ 3 所示。图中每条曲线对应的时刻为 $t = 0.4, 0.8, 1.2$,

1.6, 2.0, 2.4, 2.8, 3.2, 3.6, 4.0 μs 。

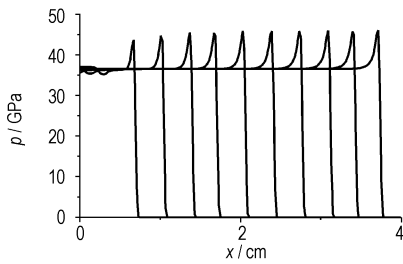


图 1 5 grids · mm⁻¹条件下爆轰波传播过程中压力变化趋势
Fig. 1 Pressure profiles of detonation wave under 5 grids · mm⁻¹

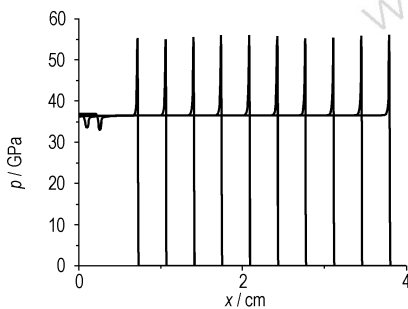


图 2 30 grids · mm⁻¹条件下爆轰波传播过程中压力变化趋势
Fig. 2 Pressure profiles of detonation wave under 30 grids · mm⁻¹

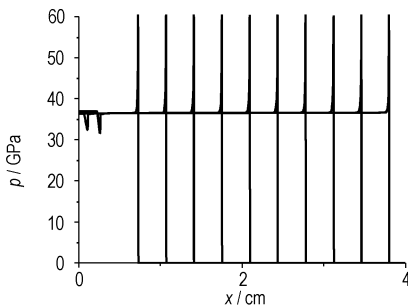


图 3 100 grids · mm⁻¹条件下爆轰波传播过程中压力变化趋势
Fig. 3 Pressure profiles of detonation wave under 100 grids · mm⁻¹

从计算结果可以看出：

(1) 随着网格变细, 计算获得的 Von Neumann 尖峰压力值变大, 反应区变窄, 达到定常状态的时间变短。这三种网格分点条件下的压力尖峰值分别为: 46, 56, 61 GPa; 反应区宽度约为: 0.18, 0.04, 0.03 cm; 定常时间约为: 1.2, 0.3, 0.2 μs 。

(2) 30 grids · mm⁻¹ 网格分点条件下的压力尖峰值最接近理论值, 否则, 更粗的网格获得的压力尖峰值低于理论值而更细的网格获得的压力尖峰值高于理论值。

5.2 一维柱面散心爆轰问题

考虑半径为 4.0 cm 的圆柱状 PBX9404, 中心以 CJ 条件起爆, 遵守上节得出的 30 grids · mm⁻¹ 网格分

点条件。获得爆轰波传播过程中几个典型时刻的压力如图 4 所示, 图中每条曲线对应的时刻为 $t = 0.05, 0.1, 0.2, 0.4, 0.8, 1.2, 1.6, 2.0, 2.4, 2.8, 3.2, 3.6, 4.0 \mu\text{s}$ 。

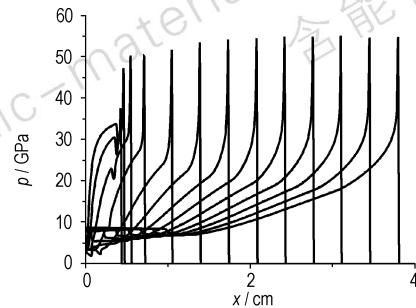


图 4 柱面散心爆轰波传播过程中压力变化趋势
Fig. 4 Pressure profiles of cylindrically divergent detonation wave

从图 4 可以看出：

(1) 散心爆轰传播过程中的最大尖峰压力值约为 54.7 GPa, 低于相应的平面爆轰的尖峰值。

(2) 反应区宽度为 0.07 cm 左右, 比相应的平面爆轰的反应区宽 54% ~ 60%。

(3) 爆轰传播 3.0 μs 后压力尖峰值变化不明显。

5.3 柱面散心爆轰的正规反射和 Mach 反射问题

考虑在无限厚的 PBX9404 炸药表面上有相距 2l 两线 A 和 B 同时起爆 (见图 5), 产生两列相同的柱面散心爆轰波 a, 这两列散心爆轰波传播到对称面 Ox 处发生碰撞形成 b, 接着继续向前传播形成 c 产生正规反射波, 之后进一步向前传播形成 d 产生 Mach 反射波。由于在相互作用点处压力相对增高, 所以在对称面附近会引起速度增加, 初始落后的 Mach 波会逐渐追上散心入射波, 最后两散心波阵面趋于一致。

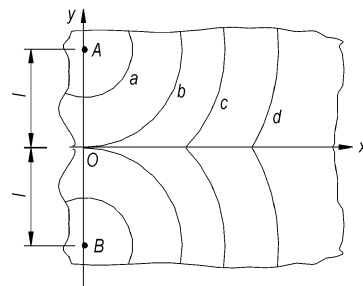


图 5 柱面散心爆轰波传播与相互作用
Fig. 5 Propagation and interaction of cylindrically divergent detonation wave

采用文献[1]中的算例, 两起爆点间距为 5.08 cm, 计算域取为下半平面, 得到不同时刻流场内压力分布 (见图 6(a ~ f))。其中图 6(a) 为炸药起爆形成散心爆

轰波,图6(b)为两散心爆轰波在对称面处发生正碰,图6(c)为爆轰波正规反射,图6(d)为正规反射向Mach反

射过渡,图6(e)为爆轰波Mach反射,图6(f)显示整个波阵面趋于一致。该结果与文献[1]结果吻合。

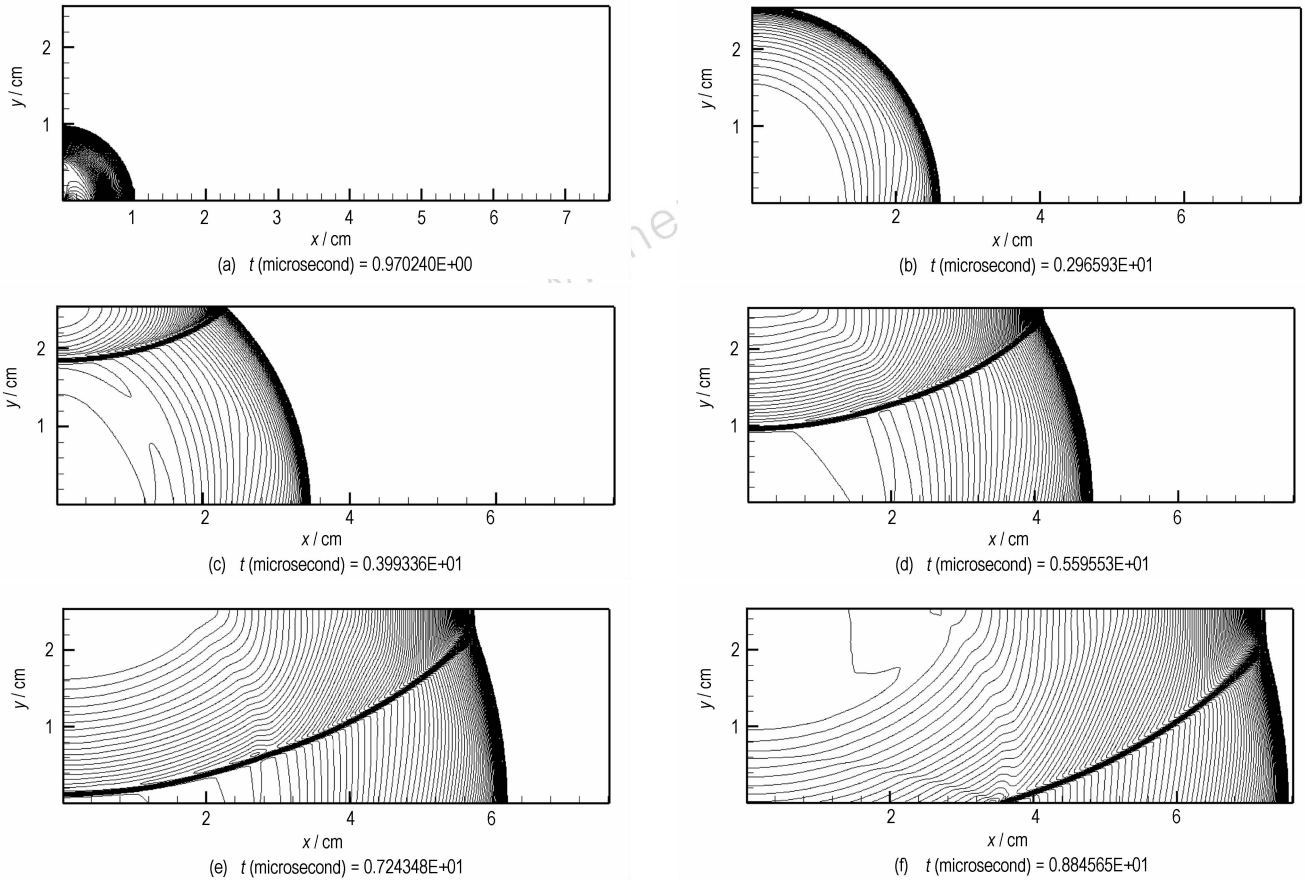


图6 柱面散心爆轰波反射压力图

Fig. 6 Pressure contours of regular reflection for cylindrically divergent detonation wave

爆轰波入射角大于 50° 左右时,出现Mach反射,在爆轰波相互作用点附近形成三波点A(见图7),其中AB为入射的爆轰波,AC为Mach杆,AD为反射的冲击波。Mach杆后的压力比爆轰波后的压力大25%~30%,这种压力的增高使得Mach杆传播速度比爆轰波快约11%~13%,因此Mach波会逐渐赶上爆轰波。

6 结论

建立了一种改进的Euler方法来数值模拟凝聚炸药爆轰。从一维平面爆轰、一维柱面散心爆轰以及柱面散心爆轰的反射等几个典型算例来看,该方法能够正确预测凝聚炸药爆轰的起爆及传播过程中的关键特征,如Von Neumann尖峰和化学反应区等。

参考文献:

- [1] Mader C L. Numerical Modeling of Explosives and Propellants[M]. 2nd Edition. CRC Press, New York. 1998.
- [2] 章冠人,陈大年. 凝聚炸药起爆动力学[M]. 北京:国防工业出版社,1991.
- [3] Lee E L, Tarver C M. Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives[J]. *Physics of Fluid*, 1980, 23(12): 2362-2372.
- [4] LeVeque Randall J. Wave propagation algorithms for multidimensional hyperbolic systems[J]. *Journal of Computational Physics*, 1997, 131(1): 327-353.

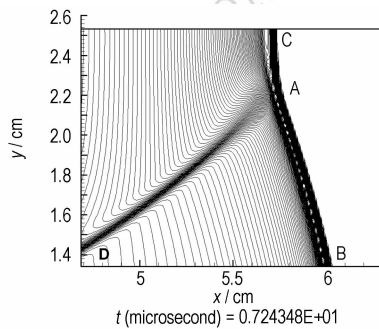


图7 柱面散心爆轰波Mach反射压力图

Fig. 7 Pressure contours of Mach reflection for cylindrically divergent detonation wave

Numerical Simulation of Detonation in Condensed Explosives by Using an Improved Eulerian Method

ZHANG Bo¹, YU Ming²

(1. Branch No. 25 of Group 96411, Baoji 721006, China;

2. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

Abstract: An improved Eulerian method is constructed to numerically simulate the detonation course in the condensed explosives. The ignition and growth model by Lee-Tarver is used in the chemistry reaction law of explosives. The model has the following assumptions that the mixing materials are composed of the unreacted explosives and reacted products in the chemistry reaction zone, 1) have the addition of the volumes; 2) arrive at the equilibrium state about dynamics and 3) arrive at the nonequilibrium state about thermodynamics. On the basis of three assumptions, first of all, Euler equations are adopted to describe the flow motion of the mixing materials, and then the physical parameters of each material constituent, such as fraction mass, fraction volume and fraction total energy, are described through an additional set of equations. Moreover, the pressure equation about the mixing materials is coupled to the above equations, and the obtained equations of fluid flow are discretized and solved by a finite volume algorithm with high resolution and high precision. From some representative examples about unsteady detonation, the key characteristics of initiation and propagation of detonation course, such as Von Neumann spike pressure and reaction zone width can be correctly predicted by this method. The results show that the method to numerically simulate the detonation course in the condensed explosives is reasonable.

Key words: explosion mechanics; condensed explosive; detonation; ignition and growth model; energy equation of material constituent; Euler equation

(上接 173 页)

The Coating and Desensitization of CL-20

CHEN Lu-ying, ZHAO Sheng-xiang, YANG Pei-jin, HENG Shu-yun, LI Wei, HUANG Xiao-wu

(Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China)

Abstract: The solubility of CL-20 and a number of polymer binders were investigated, and suitable solvents and polymer binders were selected for coating and desensitization of CL-20 with water-suspension coating method. The impact and friction sensitivity test results indicate that the "Estane-G" composite consisting of polymer Estane and graphite, and 20% TATB with small particle size (less than 1 μm) in the compositions is effective on coating and desensitization of CL-20, and the explosion temperature test results indicate that the coating do not affect the thermal sensitivity of CL-20.

Key words: applied chemistry; CL-20; solubility; desensitization



关于 2006 年《钝感弹药研究论文专辑》的征稿启事

高能钝(低)感弹药一直以来是含能材料领域研究重点之一,为促进高能钝(低)感弹药在火炸药、推进剂等领域的应用研究,本刊将于 2006 年 10 月(第 5 期)组织出版《钝感弹药研究论文专辑》。专辑内容涉及高能钝(低)感弹药的合成、配方、性能测试与表征、工艺与相关技术研究及其应用和发展方向。

欢迎科研工作者来稿,来稿请注明“钝感弹药研究论文专辑”。