

炸药爆轰的连续介质本构模型和数值计算方法*

周洪强[†] 于明 孙海权 董贺飞 张凤国

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

(2014年2月28日收到; 2014年6月18日收到修改稿)

假定炸药和爆轰产物处于局部热力学平衡状态, 即它们的压力和温度相同, 利用热力学基本关系建立炸药爆轰过程的连续介质本构模型的一般理论框架. 在此框架下, 炸药爆轰本构模型由一组常微分方程构成, 包括炸药和爆轰产物的状态方程、简单混合法则、化学反应速率方程和能量守恒方程, 易于由成熟的计算方法如梯形法等进行求解. 一组广义 Maxwell 型非线性固体本构形式的微分方程描述了压力和温度随时间的演化速率与应变率和化学反应速率的关系, 借助简单混合物理论, 其中的系数由炸药和爆轰产物的材料参数确定. 未反应的炸药和爆轰产物采用 JWL 状态方程, 化学反应率方程采用 Lee-Tarver 点火-燃烧二项式模型, 模拟 PBX-9404 炸药的一维冲击波起爆过程和爆轰波传播过程. 计算结果表明了本文给出的本构模型和相应计算方法的有效性.

关键词: 炸药爆轰, 本构模型, 化学反应率方程, 数值模拟

PACS: 47.40.Rs, 47.40.Nm, 82.40.Fp

DOI: 10.7498/aps.63.224702

1 引言

爆轰反应流动是一个伴有大量能量释放的、集高温高压和高速为一体的复杂过程, 是一类跨声速、高度非线性、时空尺度包含几个量级差异的流体动力学问题, 数学上极其困难. 利用数学解析方法只能求解其中的一些简单问题, 近代爆轰的理论研究主要依靠数值模拟^[1-3]. 爆轰过程的本构关系联立守恒方程构成了爆轰数值模拟的理论框架, 本构关系包括炸药和爆轰产物组成的混合物的状态方程和反应速率方程. 典型的显式爆轰模拟程序的一个时间步的计算步骤包括: 首先由质量和动量方程得到材料密度, 接着显式求解能量方程得到材料内能, 最后求解本构关系得到其他宏观物理量. 一个常用的本构关系计算方法是将反应速率方程和材料状态方程解耦: 显式或隐式计算反应速率方程得到反应进度, 利用牛顿法迭代计算混合状态方程得到炸药和爆轰产物的压力和温度等^[4-6]. 因此,

寻求高效的本构关系计算方法是提高爆轰数值模拟能力的重要方面.

本文将爆轰过程的本构关系和能量方程联立耦合求解: 假定炸药和爆轰产物处于局部热力学平衡状态, 利用热力学基本关系, 得到描述炸药爆轰过程的连续介质本构模型的一般理论框架. 在此框架下, 炸药爆轰本构模型由压力、温度和反应度等为因变量的常微分方程组构成, 易于由一些常微分方程初值问题的成熟计算方法如隐式的梯形法等进行求解. 作为算例, 采用一维有限差分弹塑性流体动力学程序, 对 PBX-9404 炸药的冲击波起爆过程和爆轰波传播过程进行数值模拟, 验证此爆轰本构模型及计算方法.

2 连续介质本构模型

爆轰数值模拟常使用的基本方程是不定常可压缩理想流体力学方程和相应化学反应方程相联

* 中国工程物理研究院科学技术发展基金(批准号: 2013A0201010, 2013B0101014) 和国家自然科学基金(批准号: 11272064) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: zhouhq@iapcm.ac.cn

立而耦合的方程组:

$$\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

$$\rho \dot{\mathbf{u}} + \nabla p = 0, \quad (2)$$

$$\dot{E} + p \dot{V} = 0, \quad (3)$$

$$\dot{\lambda} = R(p, T, \lambda), \quad (4)$$

$$V = V(p, T, \lambda), \quad (5)$$

$$E = E(p, T, \lambda), \quad (6)$$

其中 \mathbf{u} 为混合物的质点速度; ρ , $V = 1/\rho$, E , p 和 T 分别为混合物的密度、比容、比内能、压力和温度; λ 为化学反应进度, 取为爆轰产物的质量份额, 满足 $0 \leq \lambda \leq 1$; R 为反应率函数. 方程 (1) 和 (2) 分别为质量和动量守恒方程, (3) 式为能量守恒方程, (4) 式为化学反应率方程, (5) 和 (6) 式是炸药和爆轰产物所组成的混合物的状态方程, 其中已经假定了炸药和爆轰产物处于局部热力学平衡状态, 即它们的压力和温度相同. 显式拉氏程序模拟爆轰过程, 混合物的密度 ρ 和比容 V 由质量和动量守恒方程得到, 在能量守恒方程和本构关系计算开始时是已知量, 因此上述 (3)—(6) 式四个方程仅包含四个未知量 p , T , E 和 λ , 它们组成了代数-微分方程形式的炸药爆轰连续介质本构模型. 这是一种带约束条件的常微分方程组的初值问题, 约束条件为状态方程 (5) 和 (6).

求解代数-微分方程的一种有效算法是将约束条件求微分, 把带约束条件的常微分方程组的初值问题转化为纯粹的常微分方程组的初值问题, 从而可以利用成熟的常微分方程初值问题的数值方法进行求解^[7,8], 如隐式的 Euler 法或梯形法等可以比较容易地对这组方程进行求解. 利用这种方式, 不仅可以得到有效计算爆轰过程的数值方法, 还可以将炸药爆轰过程描述为具有更明确物理的广义 Maxwell 方程形式的连续介质本构模型.

具体推导过程如下. 对混合物状态方程 (5) 和 (6) 式时间微分:

$$\begin{aligned} \dot{V} &= \left(\frac{\partial V}{\partial \lambda}\right)_{p,T} \dot{\lambda} + \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T,\lambda} \dot{p} \\ &+ \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p,\lambda} \dot{T}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \dot{E} &= \left(\frac{\partial E}{\partial \lambda}\right)_{p,T} \dot{\lambda} + \left(\frac{\partial E}{\partial p}\right)_{T,\lambda} \dot{p} \\ &+ \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{p,\lambda} \dot{T}. \end{aligned} \quad (8)$$

将能量守恒方程 (3) 代入以上两式, 利用热力学基本关系可以得到压力和温度的时间演化表达式^[9]:

$$\begin{aligned} \dot{p} &= a_{S,\lambda}^2 \dot{\rho} + \frac{K_{S,\lambda}}{VC_{p,\lambda}} \left[\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{p,\lambda} \left(\frac{\partial V}{\partial \lambda}\right)_{p,T} \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p,\lambda} \left(\frac{\partial E}{\partial \lambda}\right)_{p,T} \right] \dot{\lambda}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \dot{T} &= \frac{\Gamma_\lambda T}{\rho} \dot{\rho} - \frac{K_{S,\lambda}}{VC_{p,\lambda}} \left[\left(\frac{\partial E}{\partial p}\right)_{T,\lambda} \left(\frac{\partial V}{\partial \lambda}\right)_{p,T} \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T,\lambda} \left(\frac{\partial E}{\partial \lambda}\right)_{p,T} \right] \dot{\lambda}, \end{aligned} \quad (10)$$

其中 $a_{S,\lambda}$, $C_{p,\lambda}$, Γ_λ 和 $K_{S,\lambda}$ 分别为材料混合物“冻结”(即炸药和爆轰产物的含量暂时固定) 状态下混合物的等熵体积声速、定压比热、Gruneisen 系数和等熵体积模量. 此时, 方程 (3), (4), (9) 和 (10) 组成了常微分方程形式的炸药爆轰连续介质本构模型的一般理论框架.

炸药爆轰是一种特殊形式的材料相变过程, (9) 和 (10) 式是描述材料相变过程的普适方程, Hayes^[9] 首先将其用于描述金属铋的固-固多形性相变和固体的熔化过程. 显然, 当不存在爆轰化学反应时, 即 $\dot{\lambda} = 0$, 压力和温度随密度的变化过程是等熵的. 压力的表达式展开为

$$\dot{p} - a_{S,\lambda}^2 \dot{\rho} + F = 0, \quad (11)$$

与广义 Maxwell 型非线性固体本构方程的形式相同, 其中 F 为松弛函数:

$$\begin{aligned} F &= - \frac{K_{S,\lambda}}{VC_{p,\lambda}} \left[\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{p,\lambda} \left(\frac{\partial V}{\partial \lambda}\right)_{p,T} \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p,\lambda} \left(\frac{\partial E}{\partial \lambda}\right)_{p,T} \right] \dot{\lambda}, \end{aligned} \quad (12)$$

上式表明松弛过程与化学反应率的大小相关. 对于温度可以进行相同的解释, 另外, 利用热力学基本关系可得松弛函数的等价表达式 $F = -(\partial p / \partial \lambda)_{E,V} \dot{\lambda}$ ^[1,2].

混合物的状态方程由炸药和爆轰产物的单相状态方程利用简单混合法则得到. 设炸药和爆轰产物的状态方程为

$$V_i = V_i(p, T) \quad i = 1, 2, \quad (13)$$

$$E_i = E_i(p, T) \quad i = 1, 2, \quad (14)$$

其中下标 1 和 2 分别表示未反应的炸药和爆轰产物的物理量, 则混合物的状态方程为

$$V = (1 - \lambda)V_1(p, T) + \lambda V_2(p, T), \quad (15)$$

$$E = (1 - \lambda)E_1(p, T) + \lambda E_2(p, T) - \lambda Q, \quad (16)$$

其中 Q 为单位质量炸药化学反应释放能. 此时方程 (9) 和 (10) 式化为

$$\dot{p} = a_{S,\lambda}^2 \dot{\rho} + \frac{K_{S,\lambda}}{VC_{p,\lambda}} \left[\left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{p,\lambda} (V_2 - V_1) - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{p,\lambda} (E_2 - E_1 - Q) \right] \dot{\lambda}, \quad (17)$$

$$\dot{T} = \frac{\Gamma_\lambda T}{\rho} \dot{\rho} - \frac{K_{S,\lambda}}{VC_{p,\lambda}} \left[\left(\frac{\partial E}{\partial p} \right)_{T,\lambda} (V_2 - V_1) - \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_{T,\lambda} (E_2 - E_1 - Q) \right] \dot{\lambda}. \quad (18)$$

联系 \dot{p} , \dot{T} 和 $\dot{\rho}$, $\dot{\lambda}$ 的系数只与“冻结”状态下的混合物的热力学性质有关, 尽管整个爆轰混合物不一定处于热力学平衡状态, 但是借助简单混合物理论可以由炸药和爆轰产物的材料参数求出这些系数.

3 计算方法

炸药的爆轰是一个带化学反应的激波传播过程, 为了模拟激波需要引入人工黏性. PIC 形式和 Landshoff 形式的人工黏性仅与当前的材料密度和质点速度相关^[3], 在能量守恒方程和本构关系计算开始时是已知量, 因而人工黏性表示为它们的和的形式时并不额外引入未知量, 此时能量方程修正为

$$\dot{E} + (p + q)\dot{V} = 0, \quad (19)$$

其中 q 为表示成 PIC 形式和 Landshoff 形式之和的人工黏性.

化学反应率方程 (4)、炸药和爆轰产物的单相状态方程 (13) 和 (14)、压力和温度的时间演化方程 (17) 和 (18)、能量守恒方程 (19) 组成封闭代数-微分方程, 将其转化为常微分方程并整理得

$$\begin{aligned} \dot{\lambda} &= R(p, T, \lambda), \\ \dot{E} &= -(p + q)\dot{V}, \\ \dot{p} &= a_{S,\lambda}^2 \dot{\rho} + \frac{K_{S,\lambda}}{VC_{p,\lambda}} \left[\left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{p,\lambda} (V_2 - V_1) - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{p,\lambda} (E_2 - E_1 - Q) \right] \dot{\lambda}, \\ \dot{T} &= \frac{\Gamma_\lambda T}{\rho} \dot{\rho} - \frac{K_{S,\lambda}}{VC_{p,\lambda}} \left[\left(\frac{\partial E}{\partial p} \right)_{T,\lambda} (V_2 - V_1) - \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_{T,\lambda} (E_2 - E_1 - Q) \right] \dot{\lambda}, \\ \dot{V}_i &= \left(\frac{\partial V_i}{\partial p} \right)_T \dot{p} + \left(\frac{\partial V_i}{\partial T} \right)_p \dot{T} \quad i = 1, 2, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\dot{E}_i = \left(\frac{\partial E_i}{\partial p} \right)_T \dot{p} + \left(\frac{\partial E_i}{\partial T} \right)_p \dot{T} \quad i = 1, 2.$$

在有限元或有限差分程序的一个典型时间计算步 $[t^n, t^{n+1}]$ 中, 动量和质量守恒方程的计算可以得到混合物的密度 ρ 和比容 V 、时间导数 $\dot{\rho}$ 和 \dot{V} 以及上述人工黏性. 因此, 方程组 (20) 中的 8 个方程仅含有 8 个未知量 $\mathbf{y} = (\lambda, E, p, T, V_1, V_2, E_1, E_2)^T$. 将 (20) 式记作

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{y}), \quad (21)$$

已知 t^n 时刻的 \mathbf{y}^n , 可以采用求解常微分方程组的梯形法则迭代求解 t^{n+1} 时刻的 \mathbf{y}^{n+1} . 实际计算时, 初始近似 $\mathbf{y}^{n+1(0)}$ 可以由显式 Euler 法求出, 从而得到预测校正格式的完整梯形法计算公式^[8]:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}^{n+1(0)} &= \mathbf{y}^n + (t^{n+1} - t^n)\mathbf{f}(\mathbf{y}^n), \\ \mathbf{y}^{n+1(m+1)} &= \mathbf{y}^n + \frac{1}{2}(t^{n+1} - t^n) \\ &\quad \times [\mathbf{f}(\mathbf{y}^n) + \mathbf{f}(\mathbf{y}^{n+1(m)})] \\ m &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (22)$$

4 算例

采用上述数值计算方法将爆轰本构模型加入一维有限差分弹塑性流体动力学程序中, 对 PBX-9404 炸药进行一维冲击起爆数值计算, 模拟厚度为 10 mm 的无氧化紫铜飞片以 600 m·s⁻¹ 的速度撞击长度为 20 mm 的 PBX-9404 炸药. 计算中铜飞片采用理想塑性和 Gruneisen 状态方程, 模型和参数取自文献^[10]. 炸药和爆轰产物采用 JWL 状态方程^[11]:

$$\begin{aligned} p &= A_i \exp(-R_{1i}\bar{V}) + B_i \exp(-R_{2i}\bar{V}) \\ &\quad + \frac{\omega_i}{\bar{V}} C_{vi} T \quad i = 1, 2, \\ E_i &= \frac{A_i}{R_{1i}} \exp(-R_{1i}\bar{V}) + \frac{B_i}{R_{2i}} \exp(-R_{2i}\bar{V}) \\ &\quad + C_{vi} T \quad i = 1, 2, \end{aligned} \quad (23)$$

其中 $\bar{V} = V/V_{01}$, V_{01} 为炸药的初始比容; A_i , B_i , R_{1i} , R_{2i} , ω_i 和 C_{vi} 为材料常数, 取自文献^[12]. 爆轰计算采用点火-燃烧二项式的 Lee-Tarver 化学反应率方程^[12]:

$$\dot{\lambda} = I(1 - \lambda)^{2/9} \eta^4 + G(1 - \lambda)^{2/9} \lambda^{2/3} p^z, \quad (24)$$

其中 $\eta = V_{01}/V_1 - 1$; G , I 和 z 为材料常数, 取自文献^[12]. 本构模型的迭代计算以压力和温度的相对误差控制收敛速度.

图1是距起爆面不同位置的压力剖面, 每条压力剖面线下的数字表示离起爆面的距离, 单位为mm. 图2给出了不同时刻的约化压力 p/p_{CJ} ($p_{CJ} = 37$ GPa, 炸药爆轰的CJ压力) 和炸药质量份额 $1 - \lambda$ 在空间的分布, 每条曲线右边的数字表示离起爆面碰撞的时间, 单位为 μs . 数值计算结果成功地展示了PBX-9404炸药爆轰过程的基本特征. 本文的计算同时表明预测校正格式梯形法的计算效率比较高: PBX9404炸药本构模型在一个计算时间步内所需计算迭代次数不超过20步.

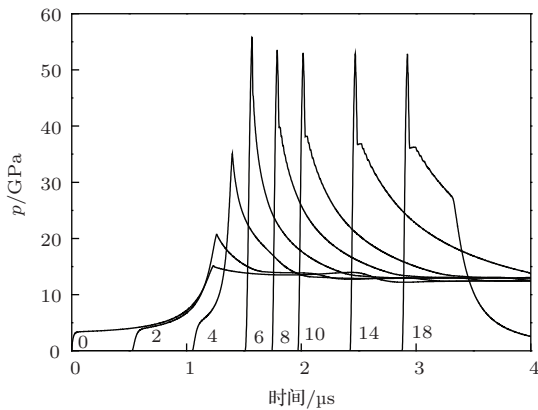


图1 不同Lagrange质点的压力剖面

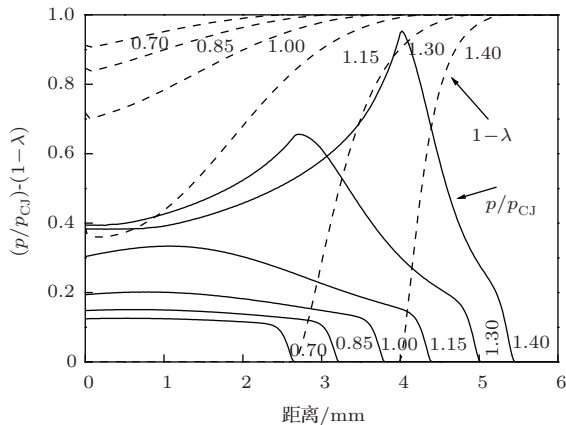


图2 不同时刻约化压力 p/p_{CJ} 和炸药质量份额 $1 - \lambda$ 的空间分布

5 结 论

本文建立的描述局部压力和热平衡状态下材料爆轰过程的连续介质本构模型, 包含一组广义Maxwell型非线性固体本构形式的常微分方程, 将压力和温度随时间的变化速率与应变率和化学反应率相联系, 易于由隐式的Euler法或梯形法等进行求解. 对PBX-9404炸药一维冲击起爆的数值模拟结果表明, 本文建立的本构模型和相应的数值计算方法是有效的.

参考文献

- [1] Sun J S, Zhu J S 1995 *Theory of Detonation Physics* (Beijing: National Defense Industry Press) (in Chinese) [孙锦山, 朱建士 1995 理论爆轰物理 (北京: 国防工业出版社)]
- [2] Sun C W, Wei Y Z, Zhou Z K 2000 *Application of Detonation* (Beijing: National Defense Industry Press) (in Chinese) [孙承伟, 卫玉章, 周之奎 2000 应用爆轰物理 (北京: 国防工业出版社)]
- [3] Mader C L 2008 *Numerical Modeling of Explosives and Propellants* (New York: CRC Press) p373
- [4] Johnson J N, Tang P K, Forest C A 1985 *J. Appl. Phys.* **57** 4323
- [5] Sun C W 1986 *Chin. J. Comput. Phys.* **3** 142 (in Chinese) [孙承伟 1986 计算物理 **3** 142]
- [6] Zhang G R, Chen D N 1991 *Detonation Dynamics of Agglomerate Detonation* (Beijing: National Defense Industry Press) p142 (in Chinese) [章冠人, 陈大年 1991 凝聚炸药起爆动力学 (北京: 国防工业出版社) 第142页]
- [7] Brenan K E, Campbell S L, Petzold L R 1996 *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations* (Philadelphia: SIAM) p4
- [8] Ascher Uri M, Petzold L R 1998 *Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations* (Philadelphia: SIAM)
- [9] Hayes D B 1975 *J. Appl. Phys.* **46** 3438
- [10] Johnson J N 1981 *J. Appl. Phys.* **52** 2812
- [11] Sun H Q, Zhang W H 2006 *Chin. J. Energ. Mater.* **14** 16 (in Chinese) [孙海权, 张文宏 2006 含能材料 **14** 16]
- [12] Lee E L, Tarver C M 1980 *Phys. Fluids* **23** 2362

A continuum constitutive model and computational method of explosive detonation*

Zhou Hong-Qiang[†] Yu Ming Sun Hai-Quan Dong He-Fei Zhang Feng-Guo

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China)

(Received 28 February 2014; revised manuscript received 18 June 2014)

Abstract

Some basic thermodynamic relationships are used to develop a theoretical framework for modeling the detonation in explosives, on the assumption that explosive and detonation product are in a local thermodynamic equilibrium state, i.e., their pressures and temperatures are identical. Using this framework, a continuum constitutive model for explosive detonation is composed of a group of ordinary differential equations including the state equations of explosive and its product, simple mixing law, reaction rate equation and energy conservation equation, which are easily solved by a mature computational method such as trapezoidal rule. A group of nonlinear constitutive equations in a generalized Maxwellian form describe the relationship among the time evolution rates of pressure and temperature, the strain rate, and the chemical reaction rate. Coefficients appearing in the constitutive equations are determined only by parameters of the explosive and the product through using simple mixing rule. The continuum constitutive model and the corresponding computational method are verified by simulating the detonation behaviour of PBX9404 impacted by high velocity Cu flyer, and in the simulation the JWL equation of state for unreacted explosive and detonation product and the two-term Lee-Tarver reaction rate equation are adopted.

Keywords: explosive detonation, constitutive equation, reaction rate, numerical simulation

PACS: 47.40.Rs, 47.40.Nm, 82.40.Fp

DOI: [10.7498/aps.63.224702](https://doi.org/10.7498/aps.63.224702)

* Project supported by the Science and Technology Development Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant Nos. 2013A0201010, 2013B0101014) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11272064).

[†] Corresponding author. E-mail: zhouhq@iapcm.ac.cn