爆轰波绕射问题的高精度数值模拟研究

马天宝¹, 马凡杰¹, 李平², 李健^{1*}

1. 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081;

2. 中国工程物理研究院流体物理研究所, 绵阳 621900

* E-mail: jian_li@bit.edu.cn

收稿日期: 2020-12-06; 接受日期: 2021-01-15; 网络版发表日期: 2021-03-03

国家自然科学基金(批准号: 11532012, 11822203)资助项目

摘要 高精度数值模拟方法在具有化学反应及强间断的炸药爆轰问题数值模拟中具有重要的应用价值. 本文通过求解柱坐标系下二维轴对称反应流欧拉方程组, 采用基于Level set界面捕捉方法的欧拉型高精度多介质数值方法, 编写了凝聚相炸药非理想爆轰程序, 并对TATB基炸药在拐角效应中的死区现象进行了数值模拟研究. 通过对比基于压力的点火增长模型与基于熵函数的CREST反应燃烧模型在拐角死区问题的计算效果, 分析了两种反应模型的优势与不足, 并结合两者的优点提出了一种多判据反应速率模型. 数值模拟结果表明, 该模型可以直接对死区进行计算, 且死区高度与实验结果较为一致.

关键词 高精度数值模拟, 爆轰死区, Level set, 反应速率方程

1 引言

在国防工业和民用安全领域, 强冲击载荷下材料与结构的动态力学行为有着重要的研究意义与应用价值. 开展材料与结构动态力学行为研究, 主要的实验装置包括霍普金森杆、轻气炮等冲击加载装置和平面波发生器等爆轰加载装置. 对于爆轰加载问题, 由于平面波发生器等爆轰加载装置结构较为复杂, 因此需要采取高精度的数值模拟方法对炸药的起爆与爆轰波传播问题进行深入研究, 为爆轰加载装置的精细设计提供理论依据.

在炸药的起爆、爆轰波传播过程中, 由于存在冲击波与化学反应的耦合, 数值模拟存在较为复杂的流动特性. 低阶精度的数值格式容易引入数值耗散、色

散等非物理误差, 造成数值解的抹平或振荡, 难以如实地对物理过程进行展示. 为了提升程序对复杂场景(如安全防护、武器研发、反恐预演等^[1~5])的仿真能力, 需要采用高分辨率的数值格式以提高计算精度、优化计算结果. 炸药死区是含能材料在冲击波传过后未发生反应的爆轰失效区, 广泛存在于局部冲击强度不足的凝聚相炸药, 常出现在爆轰波的绕射问题中. 爆轰波绕射问题中的死区现象涉及了冲击起爆、爆轰波传播与失效等问题, 具有极强的科学研究价值与现实意义.

爆轰波绕射与失效问题通常采用试验与数值模拟的方式进行研究. 实验方面, Ferm等人^[6]利用质子射线检查了拐角实验的未启动区域, 并观察到了一个高密度的未反应区域, 存在时间超过5 μs . Souers等人^[7]设

引用格式: 马天宝, 马凡杰, 李平, 等. 爆轰波绕射问题的高精度数值模拟研究. 中国科学: 技术科学, 2021, 51: 281–292

Ma T B, Ma F J, Li P, et al. High-resolution numerical simulation of detonation diffraction (in Chinese). Sci Sin Tech, 2021, 51: 281–292, doi: 10.1360/SST-2020-0484

计了hockey puck实验,用以测量LX-17爆轰波的散度和实验中死区的位置,并拍摄了X射线图像来观察爆轰波的细节. Hill^[8]提出了一种改良的CYLEX试验,定量推断了死区的反应性水平和时间尺度. Tarver^[9]用薄钢板覆盖半球形LX-17,观察了弱冲击波穿过钢板导致炸药减敏与爆轰失效现象. 以上实验表明,较为钝感的三氨基三硝基苯(TATB)基炸药死区比奥克托今(HMX)基炸药的死区更大、持续时间更长,且拐角效应对炸药的初始密度和组分等细微差别非常敏感. 例如,以TATB为基础的炸药PBX9502(95% TATB, 5% Kel-F)中的爆轰波比LX-17(92.5% TATB, 7.5% Kel-F)中的爆轰波更容易转弯,两者组分类似,只是LX-17的TATB含量略低. 在名义上相同的实验中,拐角效应的性能同样可能出现明显的不同. 死区实验似乎不像其他爆炸实验那样具有可重复性,因此很难根据实验结果进行定量评估^[10].

数值模拟方面,为了模拟TATB基炸药的爆轰传播与绕射问题, Bdzil和Stewart^[11]开发了爆轰冲击动力学(detonation shock dynamics, DSD)方法,适用于爆轰波曲率半径大于反应区长度的情况. Souers等人^[12]开发了一个简单的ALE反应流代码JWL++,其化学反应进程由时间决定. Lee和Tarver^[13]于1980年提出了经典的点火增长模型,并在2005年提出了适用于LX-17炸药的点火增长三项式模型^[14]. 基于Tarver提出的三项式模型, Oliveira等人^[15]提出了包含弱冲击脱敏的增强模型,并对LX-17炸药的固壁边界拐角效应进行了模拟. Banks等人^[16]对双圆柱模型的爆轰传播进行了计算,引入了强约束和弱约束的概念. 为了确定强弱约束下的拐角死区现象的异同, Schwendeman等人^[17]采用混合两相流模型对不同介质下的爆轰绕射问题进行了计算. Whitworth^[18]使用基于熵函数的CREST反应燃烧模型,计算了不同初始温度(-54°C/23°C/75°C)下PBX9502炸药的拐角效应. 根据Schwendeman等人^[17]的研究,由Tarver提出的传统点火增长模型无法表现冲击脱敏现象,因而不能在数值模拟中得到持续的死区;而基于熵函数的CREST燃烧反应模型则可以对死区进行直接计算,不需要进行额外的脱敏修正^[19]. 因此部分研究者认为,所谓的“脱敏”和死区现象仅仅是热力学与流体动力学综合作用的结果^[20].

在具体实验、工程问题的高精度数值模拟中,除了炸药本身还必然会涉及与之相连的其他介质,因此

必须考虑不同物质间的相互作用. 由于炸药爆轰过程压力可达数十GPa,爆轰波速可达数km/s,因此大部分物质可以当作流体对待,在数值模拟中则可以用多相流方法进行计算. 欧拉方法的物质界面处理技术已经有过数十年的发展,根据所采用的数值处理方案可以分为两大类:扩散界面方法(diffuse-interface method)与锐利界面方法(sharp-interface method). 前者认为,任意网格都混合着不同种物质,仅存在体积/质量分数的差异^[21];后者则假设存在确凿的物质界面,界面两侧的物质种类泾渭分明. 对于扩散界面方法,每种介质都需要有各自的质量(能量)守恒控制方程. Harlow与Welch^[22]提出了标记网格(marker-and-cell, MAC)方法,将有限差分法与标记点相结合,用以求解不可压缩自由表面流动问题. Hirt与Nichols^[23]提出了流体体积(volume-of-fluid, VOF)方法,通过定义流体体积函数来实现对运动界面的追踪. Xiao等人^[24]利用双曲正切函数,提出了适用于VOF方法的简单界面压缩格式THINC. Allaire等人^[25]开发了多相流的五方程模型, Michael和Nikiforakis^[26]则根据五方程模型开发了增强型欧拉多相流杂交模型. Saurel等人^[27]在五方程的基础上给出了六方程模型,该模型将反应流的总能量守恒方程根据物质种类划分成两个控制方程. Murrone和Guillard^[28]利用七方程模型推导了Baer-Nunziato^[29]型控制方程组.

Level set方法则是典型的锐利界面方法^[30]. 该方法设置了一个用以描述距离的演化方程,并以距离函数的零等势面作为不同介质的物质界面. Fedkiw等人^[31]提出了虚拟流体方法(ghost fluid method, GFM),通过设置两套欧拉控制方程组的方法对多相流进行描述. Liu和Khoo^[32]为GFM引入了本地Riemann解,并评估了修正的虚拟流体方法(modified ghost fluid method, MGFM)在气-气Riemann问题上的精度. Wang等人^[33]提出了真实虚拟流体方法(real ghost fluid method, RGFM),通过在界面两侧构建Riemann问题来预测界面处的物理状态,并将对应的物理参数外推至不同物质的虚拟流体部分.

从微观视角看,扩散界面似乎更加符合科学界对于世界的认知,但在实际数值计算中界面两侧往往存在压力和物性的巨大差异,因此界面的动态性质(如气泡流动)在扩散界面方法中极难处理. 考虑到宏观问题中往往存在一个相对确定的物质界面,因此本文采用

锐利界面的Level set方法对物质界面进行捕捉, 并使用GFM对物质界面进行简单处理, 以保证程序的正常运行.

本文通过求解柱坐标系下二维轴对称反应流欧拉方程组, 采用自主开发的欧拉型多介质高分辨率凝聚相炸药非理想爆轰程序对TATB基炸药拐角绕射问题中的死区现象进行了数值模拟. 本文结合两种反应模型的优点, 提出了一种多判据反应速率方程. 计算结果显示, 该模型可以直接对死区进行计算, 且与实验结果的一致性较好.

2 数值方法

2.1 化学反应流欧拉控制方程组

在爆轰问题中, 可以通过在欧拉方程组增加源项的方式来实现对炸药反应进程的演化. 本文中的程序采用柱坐标下的轴对称二维欧拉方程组, 其形式为

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial r} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial z} = \mathbf{S} + \mathbf{R}, \quad (1)$$

$$\mathbf{U} = [\rho, \rho u, \rho v, \rho E, \rho \lambda]^T, \quad (2)$$

$$\mathbf{F} = \left[\rho u, \rho u^2 + p, \rho uv, \rho u \left(E + \frac{p}{\rho} \right), \rho u \lambda \right]^T, \quad (3)$$

$$\mathbf{G} = \left[\rho v, \rho uv, \rho v^2 + p, \rho v \left(E + \frac{p}{\rho} \right), \rho v \lambda \right]^T, \quad (4)$$

$$\mathbf{S} = [0, 0, 0, 0, \rho \dot{\lambda}]^T, \quad (5)$$

$$\mathbf{R} = -\frac{u}{r} [\rho, \rho u, \rho v, \rho E + p, \rho \lambda]^T, \quad (6)$$

式中, $\mathbf{S}$ 是用于描述化学反应速率的源项, 当 $\mathbf{S}$ 为0时方程组退化为不包含化学反应的经典欧拉方程组. $\mathbf{R}$ 是将三维回转体问题投影到二维柱坐标下所获得的源项, 用于计算轴对称问题; 当源项 $\mathbf{R}$ 为0时, 方程退化为笛卡尔坐标系. ρ 为密度, u, v 分别为 r, z 方向的速度. λ 为炸药的反应度, 反应未开始(初始状态)时 $\lambda=0$, 反应结束(完全反应)时 $\lambda=1$; $\dot{\lambda}$ 是反应度 λ 对时间的导数, 代表炸药的化学反应速率. p 代表压力, 纯物质的压力可以根据状态方程直接求解, 反应区中混合流体的压力则需要根据混合规则进行迭代求解. E 是单位质量的总能量, 包含内能、动能、化学能三部分, 可以表示为

$$E = e + (u^2 + v^2)/2 + (1 - \lambda)Q, \quad (7)$$

式中, e 为比内能, Q 为反应释放的能量.

2.2 反应速率模型与状态方程

本文采用CREST反应燃烧模型^[34]与Finite strain状态方程^[35]进行炸药爆轰波拐角绕射问题的计算. 相较于更为常用的Lee-Tarver点火增长模型, CREST模型形式虽然较为复杂, 但其反应速率基于熵函数进行变化, 可以更为真实地反映温度和炸药性能历史所带来的影响, 并且可以在不添加额外钝化修正的情况下自然地对待拐角死区进行直接计算. CREST反应燃烧模型的形式为

$$\dot{\lambda} = (m_1 \dot{\lambda}_1 + m_2 \dot{\lambda}_2 + m_3 \dot{\lambda}_3) \cdot (1 - \lambda), \quad (8)$$

$$\dot{\lambda}_1 = (1 - \lambda) \sqrt{-2b_1 \ln(1 - \lambda_1)}, \quad (9)$$

$$\dot{\lambda}_2 = \lambda_1 (1 - \lambda_2) \sqrt{2b_2 \left(\frac{b_2 \lambda_1}{b_1} - \ln(1 - \lambda_2) \right)}, \quad (10)$$

$$\dot{\lambda}_3 = \lambda_1 (1 - \lambda_3) \sqrt{2b_3 \left(\frac{b_3 \lambda_1}{b_1} - \ln(1 - \lambda_3) \right)}, \quad (11)$$

式中,

$$b_1 = c_0 (Zs)^{c_1}, \quad (12)$$

$$b_2 = c_2 (Zs)^{c_3}, \quad (13)$$

$$b_3 = c_4 (Zs)^{c_5}, \quad (14)$$

$$m_1 = c_8 + \left(\frac{c_6 (Zs)^{c_{10}}}{\sqrt{b_1}} - c_8 \right) \exp[-c_9 (Zs)^{c_7}], \quad (15)$$

$$m_2 = \frac{c_{12} (Zs - c_{13})^{c_{11}}}{\sqrt{b_2}}, \quad (16)$$

$$m_3 = c_{14} (Zs)^{c_{15}}. \quad (17)$$

该模型是基于熵函数的三步反应速率方程, 总反应速率通过分步反应加权求和获得. 式中 λ 为总反应度, $\dot{\lambda}_1, \dot{\lambda}_2, \dot{\lambda}_3$ 分别是不同步的反应速率, m_1, m_2, m_3 为各反应步的权重. Zs 是熵函数, 通过状态方程计算获得. $c_0 \sim c_{15}$ 为常数, 本文所使用的参数见表1, 单位制采用Mbar, g, cm和 μs . 对于PBX 9502炸药, 要求 $b_1 \leq 200$, $b_2 \leq 80$, $b_3 \leq 4$, $m_1 \leq 10$, $m_2 \leq 1$, $m_3 \leq 7$.

与CREST模型配合使用的是用于描述炸药的Finite strain状态方程, 其形式为

$$p = p_i(v) + \frac{I(v)}{v} [e - e_i(v)], \quad (18)$$

表 1 PBX 9502炸药CREST反应速率模型参数^[34]
Table 1 Coefficients for CREST reaction burn model of PBX 9502 [34]

参数	数值	参数	数值
c_0	2.0×10^7	c_8	2.0
c_1	2.5	c_9	1.4×10^{12}
c_2	8.0×10^6	c_{10}	5.0
c_3	2.5	c_{11}	5.99
c_4	4.0×10^5	c_{12}	3.0×10^3
c_5	2.5	c_{13}	1.25
c_6	1.8×10^{12}	c_{14}	7.814×10^3
c_7	0.0012	c_{15}	1.6

$$e = e_i(v) + \tau(v)Zs, \quad (19)$$

$$\tau(v) = \exp\left[-\int_{v_{os}}^v \frac{\Gamma(v)}{v} dv\right], \quad \tau(v_{os}) = 1, \quad (20)$$

$$Zs = \int_{T_0}^T C_v(T) dT, \quad (21)$$

$$C_v(T) = C_{vm} - (C_{vm} - C_{v0}) \exp[-(T_1 - T_0) / T_c], \quad (22)$$

$$T = \tau(v) \cdot T_{os}, \quad (23)$$

$$\Gamma(v) = \gamma_{oo} + \Gamma_1 \cdot (v / v_{os})^m \exp[-\Gamma_2 \cdot (v / v_{os})], \quad (24)$$

$$p_i = 3k_{os}f \cdot (2f + 1)^{5/2} \cdot (F + f\dot{F} / 2), \quad (25)$$

$$e_i = \frac{9v_{os}k_{os}}{2} f^2 F, \quad (26)$$

$$f = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{v_{os}}{v} \right)^{2/3} - 1 \right], \quad (27)$$

$$F = \exp[g(f)], \quad (28)$$

$$\begin{cases} \dot{g}(f) = A_1 + 2A_2f + [B_1 + 2B_2(f - f_c)] \\ \quad \cdot \frac{1}{2} \left[1 - \frac{2}{\pi} \tan^{-1} \left(\frac{f - f_c}{\delta} \right) \right], \\ g(0) = 0, \end{cases} \quad (29)$$

式中, v 为炸药的比容, v_{os} 是炸药理论最大密度下的比容. Zs 是熵函数, 即CREST模型的基础控制变量. γ_{oo} , m , Γ_1 , Γ_2 , k_{os} , B_1 , B_2 , B_3 , A_1 , A_2 , A_3 , f_c , δ , C_{vm} , C_{v0} , T_c , T_0 为根据试验标定或利用试验结果拟合得到的常数, T_{os} 为 v_{os} 时所对应的温度(初始温度). 本文所使用的参数见表2, 单位制采用Mbar, g, cm和K.

对应反应产物, 采用常用的JWL状态方程, 其形

式为

$$p = A \left(1 - \frac{\omega \rho}{R_1 \rho_0} \right) \exp \left(-R_1 \frac{\rho_0}{\rho} \right) + B \left(1 - \frac{\omega \rho}{R_2 \rho_0} \right) \exp \left(-R_2 \frac{\rho_0}{\rho} \right) + \omega \rho e, \quad (30)$$

式中, ρ 为反应产物的密度, ρ_0 为理论最大装药密度, A , B , R_1 , R_2 和 ω 为常数. 本文所使用的参数见表3, 单位制采用Mbar, g, cm.

本文多介质计算中采用空气作为弱约束介质, 其状态方程采用理想气体状态方程, 形式为

$$p = (\gamma - 1) \rho e, \quad (31)$$

式中, γ 为绝热系数, 取值为1.4.

2.3 混合规则

对于炸药与爆轰产物的纯物质区域, 可以直接采用对应的状态方程进行求解; 但在非理想爆轰的反应区内, 在已知混合物的密度 ρ 与比内能 e 的前提下, 必须采用一定的混合规则来使控制方程组闭合, 以实现混合两相流问题的求解. 本文选择基于等熵假设的等熵模型^[37]对反应区的压力和声速进行计算, 其形式为

$$v = (1 - \lambda)v_e + \lambda v_p, \quad (32)$$

$$e = (1 - \lambda)e_e + \lambda e_p, \quad (33)$$

$$p = p_e = p_p, \quad (34)$$

$$de_e + p \cdot dv_e = 0, \quad (35)$$

式中, v 为比容, p 为压力, de_e 为炸药的比内能变化量, dv_e 为炸药的比容变化量. 下角标 e 和 p 分别代表物质类型为炸药和爆轰产物.

混合反应区压力状态的求解方法如下所示, 设:

$$v_e^{(n)} = \begin{cases} v_e^{(n-1)}, & n > 0, \\ v_0, & n = 0, \end{cases} \quad (36)$$

$$e_e^{(n)} = \begin{cases} e_e^{(n-1)} - p^{(n-1)} \cdot (v_e^{(n)} - v_e^{(n-1)}), & n > 0, \\ e_0, & n = 0, \end{cases} \quad (37)$$

$$v_p^{(n)} = [v - (1 - \lambda)v_e^{(n)}] / \lambda, \quad (38)$$

$$e_p^{(n)} = [e - (1 - \lambda)e_e^{(n)}] / \lambda. \quad (39)$$

根据对应的状态方程, 可以分别求得炸药与反应

表 2 PBX 9502炸药Finite strain状态方程参数^[36]Table 2 Coefficients of Finite strain EOS for PBX 9502 reactant ^[36]

参数	数值	单位	参数	数值	单位
γ_{oo}	0.4	—	B_2	6.534913	—
m	2	—	f_c	0.015	—
Γ_1	126.4052	—	δ	0.021322	—
Γ_2	6.554447	—	T_0	293	K
k_{os}	0.09314021	Mbar	T_c	518.5	K
A_1	0.246257	—	C_{v0}	1.068	J/(g K)
A_2	11.44221	—	C_{vm}	2.32	J/(g K)
B_1	16.8477	—			

表 3 PBX 9502反应产物JWL状态方程参数^[36]Table 3 Coefficients of JWL EOS for PBX 9502 reaction product ^[36]

参数	数值	单位	参数	数值	单位
A	4.8175	Mbar	R_2	1.659	—
B	0.11886	Mbar	ω	0.48	—
R_1	3.903	—	Q	0.0373	Mbar cm ³ /g

产物对应的压力 p_e 和 p_p ，通过牛顿迭代法和二分法，即可求得CREST模型反应混合区的压力和声速。

2.4 高精度有限差分格式

本文采用高分辨率的五阶加权本质无振荡(weighted essentially non-oscillatory, WENO)有限差分格式^[38]进行空间离散, 其半离散格式为

$$\mathbf{L}_{i,j}(\mathbf{U}) = -\frac{\hat{\mathbf{F}}_{i+1/2,j} - \hat{\mathbf{F}}_{i-1/2,j}}{\Delta r} - \frac{\hat{\mathbf{G}}_{i,j+1/2} - \hat{\mathbf{G}}_{i,j-1/2}}{\Delta z} + \mathbf{S}_{i,j}, \quad (40)$$

式中, $\hat{\mathbf{F}}_{i\pm 1/2,j}$, $\hat{\mathbf{G}}_{i,j\pm 1/2}$ 分别为 r , z 方向的数值通量, Δr , Δz 分别为 r , z 方向的单位网格尺寸. $\mathbf{S}_{i,j}$ 代表 (i,j) 点的源项, 本文中为化学反应源项与柱坐标轴对称源项之和。

时间积分采用三阶TVD Runge-Kutta方法, 其格式为

$$\begin{cases} \mathbf{U}^{(1)} = \mathbf{U}^n + \Delta t \cdot \mathbf{L}(\mathbf{U}^n), \\ \mathbf{U}^{(2)} = \frac{3}{4}\mathbf{U}^n + \frac{1}{4}[\mathbf{U}^{(1)} + \Delta t \cdot \mathbf{L}(\mathbf{U}^{(1)})], \\ \mathbf{U}^{n+1} = \frac{1}{3}\mathbf{U}^n + \frac{2}{3}[\mathbf{U}^{(2)} + \Delta t \cdot \mathbf{L}(\mathbf{U}^{(2)})]. \end{cases} \quad (41)$$

2.5 多介质界面捕捉与处理

本文采用Level set方法进行物质界面的捕捉, 其演化方程为

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi}{\partial r} + v \frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0, \quad (42)$$

式中, φ 为符号距离函数, 其中数值部分代表该节点到物质界面的最短距离, 数字前的“+”, “-”号分别代表界面两侧的不同物质。

为了保证Level set函数的意义, 必须每过一段时间进行一次重新初始化, 以实现网格间距的修正. 本文中每十个时间步进行一次重新初始化. 重新初始化函数为

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{S(\varphi_0)\varphi_r}{\sqrt{\varphi_r^2 + \varphi_z^2}}\varphi_{x_1} + \frac{S(\varphi_0)\varphi_z}{\sqrt{\varphi_r^2 + \varphi_z^2}}\varphi_z = S(\varphi_0), \quad (43)$$

$$S(\varphi_0) = \frac{\varphi_0}{\sqrt{\varphi_0^2 + \varepsilon}}, \quad (44)$$

式中, ε 为保证分母不为零的常数, 取值为0.0001.

界面附近数值处理采用GFM, 直接沿用真实流体的压力、密度与速度值. 本文中的程序在原始界面处设置了以网格节点速度为判据的限制器, 有效避免了初始界面数值抹平情况的发生。

2.6 程序验证

为了对程序的可靠性进行验证, 本文利用上述方法与参数进行了一维PBX 9502炸药在15 GPa压力下冲击起爆问题的数值模拟. PBX 9502炸药较为钝感, 拥有较长的化学反应区; 参考Whitworth的计算模型, 通过验证网格收敛性, 选取单位网格尺寸为1/50 mm^[39], 库朗数设为0.5.

计算结果如图1所示. PBX 9502炸药包含点火、增长和慢燃三个阶段, 分别对应了三个化学反应步. 其中0~2 mm近似为点火段, 该阶段反应较慢, 物理意义上可对应为炸药中单一热点的生成与燃烧; 2~5 mm近似为增长段, 是爆轰形成全过程中反应最剧烈的阶段, 物理意义上可对应为炸药中多热点的汇聚; 5~8 mm近似为慢燃阶段, 反应度较低, 物理意义上可对应为炸药不完全反应生成的固体碳颗粒在后效阶段中的缓慢燃烧. 图2所示为Gustavsen等人^[40]对PBX 9502炸药在15 GPa压力下冲击起爆过程的质点速度曲

图1 PBX 9502一维冲击起爆速度变化曲线图

Figure 1 Velocity diagram of one-dimensional (1D) SDT in the PBX 9502.

图2 PBX 9502冲击起爆实验数据^[40]

Figure 2 Experimental data of 1D SDT in the PBX 9502 [40].

线图。从图中可以看出, PBX 9502炸药在该条件下的粒子初速为1.4 km/s, 3.4 mm处的峰值速度为1.8 km/s, 5.0 mm处的峰值速度为2.3 km/s; 通过与上述实验结果对比可知, 本程序在一维条件下计算结果与实验结果吻合度较高, 可以用该程序和模型进行高维数值模拟研究。

3 CREST模型拐角绕射死区的数值模拟

为了观察分析CREST模型计算获得的炸药死区, 本文参考Ferm等人^[6]的实验模型, 对PBX 9502炸药的双圆柱拐角绕射问题进行了数值模拟。为了排除物质

界面对拐角尺寸与位置的影响, 本文分别采用刚性壁与弱约束空气介质对该问题进行了数值模拟。

3.1 PBX 9502双圆柱刚性壁问题数值模拟

PBX 9502的双圆柱问题包含传爆药柱(booster cylinder)与测试药柱(test cylinder)两部分(图3), 其中传爆药柱尺寸为 $\Phi 12 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$, 测试药柱尺寸为 $\Phi 25 \text{ mm} \times 50 \text{ mm}$ 。为了简化模型, 两者均采用PBX 9502炸药, 并忽略药柱间微小的空隙。在刚性壁问题中, 传爆药柱的下方持续传入15 GPa的压力脉冲, 以激发炸药的冲击起爆。由于该模型旋转对称, 因此可以将其控制方程进行简化, 用上文中介绍的二维柱坐标轴对称控制方程组进行计算。

设爆轰波到达拐角处的时间为0时刻, 空间坐标原点为拐角点。图4为1.95 μs 时的密度与反应度云图。此时爆轰波阵面已经绕过爆轰失效区, 到达了死区的前方; 用于弱冲击压缩的作用, 此时死区内的局部密度约为2.4~2.7 g/cm^3 , 明显高于周围炸药; 局部压力为12~16 GPa, 高于TATB炸药的临界起爆压力(8.64 GPa)^[41]。

图5所示为Whitworth利用拉格朗日型程序对常温下PBX 9502炸药双圆柱问题的计算结果^[18]。与之相比, 本文所采用的欧拉型程序在常温下双圆柱拐角爆轰问题上的密度与反应度 λ 的计算结果基本一致, 两者在死区整体尺寸与位置上没有明显区别, 死区高度(距离测试药柱下表面)约为5 mm。图6所示为Ferm通过质子射

图3 PBX 9502双圆柱拐角问题示意图。 (a) 模型的三维透视图; (b) 模型的二维剖面图

Figure 3 Perspective (a) and 2D (b) graphs of PBX 9502 corner-turning.

图 4 (网络版彩图) 1.95 μs 时刻刚性壁双圆柱问题计算结果. (a) 密度云图; (b) 反应度 λ 云图

Figure 4 (Color online) Density (a) and reaction degree (b) contours of double cylinder with rigid boundary at 1.95 μs .

图 5 (网络版彩图) Whitworth采用拉式程序的计算结果^[18]

Figure 5 (Color online) Simulation results in Whitworth's work ^[18].

图 6 质子照相密度图像实验结果^[6]

Figure 6 Volume density image of proton radiography ^[6].

线实验获得的双圆柱实验图像^[6]. 通过对比实验数据可知, CREST模型虽然能够直接计算得到死区, 但数值计算得到的死区尺寸(高度4 mm, 长度6 mm)要远小于实验结果(高度12~14 mm, 长度大于14 mm), 且死区形状与反应后产物流动形状相差较大. 考虑到刚性壁问题采用的反射边界条件忽略了物质边界对爆轰波的稀疏作用, 且会阻碍拐角处爆轰产物的流动, 因此需要采用更加复杂的多介质方法对该问题进行计算.

3.2 PBX 9502双圆柱弱约束问题数值模拟

为了确定弱约束(空气)拐角对CREST模型爆轰绕射问题的稀疏作用, 本文采用Level set方法和GFM方法进行了物质界面的捕捉与计算. 由于炸药与空气的物质界面需要进行额外处理, 因此不适合采用边界持续脉冲起爆. 该算例的初始条件如图7所示, 其中传爆药柱尺寸为 $\Phi 12 \text{ mm} \times 50 \text{ mm}$, 测试药柱尺寸依然为 $\Phi 25 \text{ mm} \times 50 \text{ mm}$. 该算例采用近似点起爆的设置方式, 在传爆药柱的下方中轴线处的点O为起爆点, 与点O的距离在5 mm内的节点物理量设置为已经形成稳定爆轰的反应区数值; 通过爆轰波在传爆药柱内的传播, 逐渐减小波阵面的曲率, 以保证拐角处能够传入近似平面波的波形.

设爆轰波到达拐角处的时间为0时刻, 空间坐标原点位于拐角点A处. 图8为2.6 μs 时的密度与反应度云图, 此时爆轰波刚刚达到距离拐角横向距离15 mm处. 对比刚性壁数值模拟结果可知该算例中死区高度为5~6 mm, 略高于图4中的计算结果, 且死区形状与反应

图 7 PBX 9502双圆柱弱约束问题的几何模型

Figure 7 Configuration of PBX 9502 double cylinder calculation with weak confinement.

产物流动形状与实验结果更吻合^[6]; 但相较于实验结果, 死区尺寸的差距依然很大(相差约10 mm). 该计算结果表明, 弱约束边界的确对拐角处存在稀疏作用, 但对死区尺寸的影响较小; PBX 9502炸药中死区的产生与炸药周围的物质种类与界面条件关系不大, 死区的物理性能仅由炸药自身性质决定.

4 多判据点火增长模型

4.1 点火增长模型的数值模拟

为了进一步分析CREST模型死区尺寸与实验结果差异较大的问题, 本文采用经典的点火增长模型^[14]对同样的问题进行了数值模拟, 混合规则采用等温假设.

图9为2.8和4.3 μs 时点火增长模型在刚性壁问题中的密度与反应度云图. 2.8 μs 时爆轰波刚刚出现向下传播、进入死区的趋势, 死区尺寸为12~13 mm; 4.3 μs 时原先的爆轰死区已经完全反应, 原本的高密度、低反应区不复存在. 对比CREST模型的计算结果可知, 虽然点火增长模型无法计算得到持久死区, 但该模型在初始死区尺寸上比CREST模型更加接近实验结果. 考虑到点火增长模型的基础变量为本地压力, 本文认为压力在拐角绕射问题中对于死区尺寸拥有较好的适用性.

4.2 多判据点火增长模型的数值模拟

本文结合CREST模型与点火增长模型的优点, 提出了一种熵修正的多判据点火增长模型. 当炸药的熵

图 8 (网络版彩图) 2.6 μs 时刻弱约束双圆柱问题计算结果. (a) 密度云图; (b) 反应度 λ 云图

Figure 8 (Color online) Density (a) and reaction degree (b) contours of double cylinder with weak confinement boundary at 2.6 μs .

较小时, 模型启用熵判据, 以熵函数为反应方程的基本变量; 而当炸药的熵较大时, 模型启用压力判据, 程序退化为经典点火增长模型, 保证了对稳定爆轰过程的计算. 该模型的形式为

$$\dot{\lambda} = RI + RG_1 + RG_2, \quad (45)$$

$$RI = I(1 - \lambda)^b (v_0 / v_e - 1 - a)^x, \quad 0 < \lambda < \lambda_{lg}, \quad (46)$$

$$RG_1 = (1 - w_{zs}) \cdot RG_{lp} + w_{zs} \cdot RG_{1zs}, \quad 0 < \lambda < \lambda_{G_1}, \quad (47)$$

$$RG_{lp} = G_{lp}(1 - \lambda)^c \lambda^d p^y, \quad (48)$$

$$RG_{1zs} = G_{1zs}(1 - \lambda)^c \lambda^d (Zs - a_{zs})^y, \quad (49)$$

$$w_{zs} = \exp[-j \cdot (Zs)^k], \quad (50)$$

图 9 (网络版彩图) 2.8 μs ((a), (b))和4.3 μs ((c), (d))时刻点火增长模型计算结果. (a), (c) 密度云图; (b), (d) 反应度 λ 云图
Figure 9 (Color online) Density ((a), (c)) and reaction degree ((b), (d)) contours using the ignition & growth reaction rate model at 2.8 μs ((a), (b)) and 4.3 μs ((c), (d)).

$$RG_2 = G_2(1 - \lambda)^e \lambda^f p^z, \lambda_{G_2} < \lambda < 1, \quad (51)$$

式中, λ 为反应度, p 为压力, Z 为熵函数, v_e 为炸药的比容; 其余为常数, 具体参数见表4. 状态方程沿用Lee-Tarver反应速率三项式所采用的JWL状态方程^[14], 混合规则采用等温假设.

图10所示为不同时刻下时多判据点火增长模型在弱约束问题中的密度与反应度云图. 2.8 μs 时, 死区高度达到最大值(约为10 mm), 爆轰波阵面开始向右下方传播. 4.2 μs 时, 爆轰波阵面到达右侧边界; 由于增长项引入了熵判据, 因此爆轰波不会传入并引爆死区. 4.8 μs 时, 爆轰波阵面已经几乎到达下侧边界, 此时死区最大高度开始降低, 死区整体尺寸逐渐缩小. 5.8 μs 时, 测试药柱整体已经几乎完全反应, 仅余下靠近空气界面的死区内的炸药未反应或部分反应; 此时, 死区尺寸进一步缩小, 高度约为5 mm. 对比Souers等人^[7]的实

表 4 PBX 9502炸药多判据点火增长模型参数

Table 4 Coefficients of multi-criterion reaction rate for PBX 9502

参数	数值	单位	参数	数值	单位
a	0.22	—	I	4.0×10^6	μs
b	0.667	—	G_{1p}	0.0045	μs
c	0.667	—	G_{1Zs}	1275.05	$(\text{kJ/g})^{-3} \text{s}^{-1}$
d	1.0	—	G_2	0.3	μs
e	0.667	—	λ_{lg}	0.02	—
f	0.667	—	λ_{G_1}	0.8	—
x	7.0	—	λ_{G_2}	0.8	—
y	3.0	—	j	14.66	$(\text{g/kJ})^{5.99}$
z	1.0	—	k	5.99	—
a_{Zs}	0.1984	kJ/g

图 10 (网络版彩图) 2.8 μs ((a), (b)), 4.2 μs ((c), (d)), 4.8 μs ((e), (f)) 和 5.8 μs ((g), (h)) 时刻多判据点火增长模型计算结果. (a), (c), (e), (g) 密度云图; (b), (d), (f), (h) 反应度 I 云图

Figure 10 (Color online) Density ((a), (c), (e), (g)) and reaction degree ((b), (d), (f), (h)) contours using the multi-criterion reaction rate model at 2.8 μs ((a), (b)), 4.2 μs ((c), (d)), 4.8 μs ((e), (f)) and 5.8 μs ((g), (h)).

验结果可知, 多判据模型在该问题中计算效果良好, 拥有较好的适应性: 相比于点火增长模型, 多判据模型可以直接对死区进行计算; 相比于CREST模型, 多判据模型的死区高度与实验结果更加吻合, 且程序的鲁棒性更强.

5 总结

本文利用柱坐标系下二维轴对称反应流欧拉方程组与Level set界面捕捉方法, 对CREST反应燃烧模型

分别在刚性壁与弱约束条件下的拐角爆轰问题进行了数值模拟, 并以死区尺寸为关键参数, 与实验结果进行了对比分析. 对比结果表明, 虽然弱约束拐角会增强界面处的能量稀疏作用, 但其影响力远不足以弥补CREST模型在死区高度上与实验数据的差距.

通过对比分析点火增长模型与CREST模型在拐角绕射问题上各自的优势, 本文提出了一种熵修正形式的多判据反应速率模型. 计算结果显示, 该模型不仅能够直接对拐角死区进行计算, 且计算得到的死区高度比CREST模型更加接近实验结果.

参考文献

- 1 Ning J, Song W, Yang G. Failure analysis of plastic spherical shells impacted by a projectile. *Int J Impact Eng*, 2006, 32: 1464–1484
- 2 Liu J P, Yang W W, Liu Y, et al. Mechanism and characteristics of thermal action of HMX explosive mixture containing high-efficiency fuel. *Sci China Tech Sci*, 2019, 62: 578–586
- 3 Ning J, Ren H, Guo T, et al. Dynamic response of alumina ceramics impacted by long tungsten projectile. *Int J Impact Eng*, 2013, 62: 60–74
- 4 Li J Q, Hao L, Li J. Theoretical modeling and numerical simulations of plasmas generated by shock waves. *Sci China Tech Sci*, 2019, 62: 2204–

2212

- 5 Ning J, Duan Y, Xu X, et al. Velocity characteristics of fragments from prismatic casing under internal explosive loading. *Int J Impact Eng*, 2017, 109: 29–38
- 6 Ferm E N, Morris C L, Quintana J P, et al. Proton radiography examination of unburned regions in PBX 9502 corner turning experiments. In: 12th American Physics Society Topical Conference on Shock Compression in Condensed Matter. Atlanta, 2001
- 7 Souers P C, Andreski H G, Cook C F, et al. LX-17 corner-turning. *Propell Explos Pyrot*, 2004, 29: 359–367
- 8 Hill L G. Is the detonation dead zone really dead? *Proc Combust Inst*, 2015, 35: 2041–2049
- 9 Tarver C M. Corner turning and shock desensitization experiments plus numerical modeling of detonation waves in the triaminotrinitrobenzene based explosive LX-17. *J Phys Chem A*, 2010, 114: 2727–2736
- 10 Handley C A, Lambourn B D, Whitworth N J, et al. Understanding the shock and detonation response of high explosives at the continuum and meso scales. *Appl Phys Rev*, 2018, 5: 011303
- 11 Bdzil J B, Stewart D S. Modeling two-dimensional detonations with detonation shock dynamics. *Phys Fluids A-Fluid Dyn*, 1989, 1: 1261–1267
- 12 Souers P C, Anderson S, Mercer J, et al. JWL++: A simple reactive flow code package for detonation. *Propellants Explos Pyrotech*, 2000, 25: 54–58
- 13 Lee E L, Tarver C M. Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives. *Phys Fluids*, 1980, 23: 2362–2372
- 14 Tarver C M. Ignition and growth modeling of LX-17 hockey puck experiments. *Propell Explos Pyrot*, 2005, 30: 109–117
- 15 de Oliveira G, Kapila A K, Schwendeman D W, et al. Detonation diffraction, dead zones and the ignition-and-growth model. In: The 13th International Detonation Symposium. Norfolk, 2006
- 16 Banks J W, Henshaw W D, Schwendeman D W, et al. A study of detonation propagation and diffraction with compliant confinement. *Combust Theor Model*, 2008, 12: 769–808
- 17 Schwendeman D W, Kapila A K, Henshaw W D. A hybrid two-phase mixture model of detonation diffraction with compliant confinement. *Comptes Rendus Mécanique*, 2012, 340: 804–817
- 18 Whitworth N J. CREST modelling of PBX 9502 corner turning experiments at different initial temperatures. *J Phys-Conf Ser*, 2014, 500: 052050
- 19 Kapila A K, Schwendeman D W, Bdzil J B, et al. A study of detonation diffraction in the ignition-and-growth model. *Combust Theor Model*, 2007, 11: 781–822
- 20 James H R, Lambourn B D. Shock desensitization in explosives: An exploration of two competing hypotheses. In: Fourteenth International Detonation Symposium. Coeur d’Alene, 2010, 1172–1181
- 21 Ning J, Chen L. Fuzzy interface treatment in Eulerian method. *Sci China Ser E-Eng Mater Sci*, 2004, 47: 550–568
- 22 Harlow F H, Welch J E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys Fluids*, 1965, 8: 2182–2189
- 23 Hirt C W, Nichols B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J Comput Phys*, 1981, 39: 201–225
- 24 Xiao F, Honma Y, Kono T. A simple algebraic interface capturing scheme using hyperbolic tangent function. *Int J Numer Meth Fluids*, 2005, 48: 1023–1040
- 25 Allaire G, Clerc S, Kokh S. A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *J Comput Phys*, 2002, 181: 577–616
- 26 Michael L, Nikiforakis N. A hybrid formulation for the numerical simulation of condensed phase explosives. *J Comput Phys*, 2016, 316: 193–217
- 27 Saurel R, Petitpas F, Berry R A. Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multiphase mixtures. *J Comput Phys*, 2009, 228: 1678–1712
- 28 Murrone A, Guillard H. A five equation reduced model for compressible two phase flow problems. *J Comput Phys*, 2005, 202: 664–698
- 29 Baer M R, Nunziato J W. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials. *Int J Multiphase Flow*, 1986, 12: 861–889
- 30 Osher S, Fedkiw R. Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces. New York: Springer, 2003. 359–367
- 31 Fedkiw R P, Aslam T, Merriman B, et al. A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *J Comput Phys*, 1999, 152: 457–492
- 32 Liu T G, Khoo B C. The accuracy of the modified ghost fluid method for gas-gas Riemann problem. *Appl Numer Math*, 2007, 57: 721–733
- 33 Wang C W, Liu T G, Khoo B C. A real ghost fluid method for the simulation of multimedium compressible flow. *SIAM J Sci Comput*, 2006, 28:

278–302

- 34 Handley C A, Lambourn B D. Predicting the effect of porosity on the shock sensitivity of explosives. *AIP Conf Proc*, 2009, 1195: 221–224
- 35 Lambourn B D, Whitworth N J, Handley C A, et al. A finite strain, non-reacted EOS for PBX 9502. *AIP Conf Proc*, 2007, 955: 137–140
- 36 Handley C A. The CREST reactive burn model. *AIP Conf Proc*, 2007, 955: 373–376
- 37 Johnson J N, Tang P K, Forest C A. Shock-wave initiation of heterogeneous reactive solids. *J Appl Phys*, 1985, 57: 4323–4334
- 38 Jiang G S, Shu C W. Efficient implementation of weighted ENO schemes. *J Comput Phys*, 1996, 126: 202–228
- 39 Whitworth N J. Mathematical and numerical modelling of shock initiation in heterogeneous solid explosives. Dissertation of Doctoral Degree. Bedford: Cranfield University, 2008
- 40 Gustavsen R L, Sheffield S A, Alcon R R. Measurements of shock initiation in the tri-amino-tri-nitro-benzene based explosive PBX 9502: Wave forms from embedded gauges and comparison of four different material lots. *J Appl Phys*, 2006, 99: 114907
- 41 Sun C W, Wei Y Z, Zhou Z K. Applied Detonation Physics (in Chinese). Beijing: National Defense Industry Press, 2000 [孙承伟, 卫玉章, 周之奎. 应用爆轰物理. 北京: 国防工业出版社, 2000]

High-resolution numerical simulation of detonation diffraction

MA TianBao¹, MA FanJie¹, LI Ping² & LI Jian¹

¹ State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China;

² Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, China

High-resolution scheme presents an important application value in discontinuous problems, such as in explosive detonation with high pressure. In this study, a high-resolution Eulerian reaction hydrodynamic code is written based on a two-dimensional axisymmetry in a cylindrical coordinate system. The Level-set method is used to track the motion interface between the explosive/reaction product and inert medium. The entropy-based CREST model and pressure-based ignition and growth model are both used to calculate the detonation diffraction at the corner turning in the TATB-based explosive. A multi-criterion reaction-rate model, which combines the two aforementioned reaction models, is also proposed. The results show that the multi-criterion reaction model can directly calculate the dead zone without extra desensitization modification, and the height of the dead zone is basically consistent with that in the experiment.

high-resolution numerical simulation, detonation dead zone, Level set, reaction-rate model

doi: [10.1360/SST-2020-0484](https://doi.org/10.1360/SST-2020-0484)