

萨利纳斯反应流率模型

Peter T. Williams[†]

[†]Mechanical Systems Department, The Aerospace Corporation, United States

摘要。我们提出了 Salinas 模型，并讨论了其在模拟转角行为（包括失效和死区形成）方面的结果。Salinas 是一个最近的反应流模型，用于模拟钝感高爆炸药中的爆轰现象，它受到了 JWL++ 模型的启发，但也借鉴了一系列适用于转角的模型。该模型计算效率高，并且自由参数最少。

介绍

不稳定高爆炸药 (IHE) 的爆轰对建模者提出了许多挑战。转角问题是其中之一。通过 IHE (有或没有约束) 转弯传播的爆轰波可能会失效，导致形成死区，在这些区域中，IHE 无法爆轰。准确、高效且值得信赖地预测这一现象对于建模者和模型使用者都极为重要，但已被证明是困难的。

我们提出了 Salinas，一个用于模拟 IHE 中爆轰的反应流模型。Salinas 能够成功捕捉到拐角处传播包括失败和死区形成的情况。该模型基于 JWL++ 模型，使用 Jones-Wilkins-Lee (JWL) 状态方程 (EOS) 对完全反应产物建模，并对未反应的高爆炸药使用一个简单的双参数 Murnaghan EOS。它受到了由劳伦斯利弗莫尔国家实验室 (LLNL) 开发的 JWL++ Tarantula 模型、点火与增长模型、

统计热点模型和 CREST 的影响。

非正式开发

令一个通过的强激波在活性热点数密度为 χ_* 处引发燃烧。假设燃烧从无限小点开始，并以生长和重叠的球形燃烧前沿进行。泊松统计表明，燃烧表面的表面积与体积之比为

$$\frac{A}{V} = (36\pi)^{1/3} \chi_*^{1/3} [-\ln(1-F)]^{2/3} (1-F) \quad (1)$$

其中 F 是燃烧分数，正在进展 $0 \rightarrow 1$ 。

(注意， $(36\pi)^{1/3}$ 是单位体积球体的表面积， $\chi_*^{-1/3}$ 是一个长度尺度，而当 F 较小时， $[-\ln(1-F)]^{2/3} (1-F) \approx F^{2/3}$ 成立。随着 F 增大，概率统计中重叠的球形燃烧前沿变得越来越显著。)

为了开发反应流的速率模型，我们只需

要知道三个额外的信息：(A) 介观衰减前沿的速度是多少，(B) 我们如何量化冲击波在潜在热点处引发燃烧的能力，(C) 给定一个通过的冲击波，实际存在的活跃热点有多少？

事实上，对于问题 (A)，我们可以声称对实际的燃烧传播速度一无所知，而只利用其尺度的方式。这里最简单的答案，与长时间对能量材料的研究保持一致，是假设燃烧传播速度与热力学压力呈简单幂律关系，因此燃烧速率与 P^b 成正比，其中 b 为某个值。为了使其更简单，我们采用通常接受的值 $b = 2$ 。

对于 (B)，我们通过冲击波达到的峰值压力来衡量“强度”——这意味着，以一种非正式的方式，其在潜在热点处引发燃烧的能力。这并不完美；我们可以想象各种反对意见——例如，我们可能会问峰值压力达到的速度有多快，以及压力保持接近峰值的时间有多长——这些都是有效的问题，毫无疑问——但我们认为它足够好了。我们遵循 JWL++ Tarantula 2011 的术语，并称其为“最大历史 P ”或 P_{mh} 。

最后，确定了 (B) 之后，我们询问敏感性在潜在热点上的分布情况，即 P_{mh} ？我们需要一个概率密度函数来衡量给定强度为 P_{mh} 的冲击会否在某个潜在热点引发燃烧的可能性。也就是说，我们需要某种概率度量来评估在每个潜在热点处引发燃烧的难易程度。一些潜在热点将非常敏感；另一些则不太敏感。

我们主张，在考虑到 IHE（例如 TATB）对触发的敏感性——这似乎一再促使建模者使用类似 $\tanh$ 的 S 型函数——的情况下，最自然的物理和数学假设是潜在热点的敏感性呈对数正态分布。换句话说，在 P_{mh} 的对数中绘制的敏感性的 PDF 是高斯分布。如果我们调用中心极限定理并假设任何给定潜在热

点的敏感性是由大量或多或少不相关的随机因素的乘积决定的话，这似乎是合理的。

我们得到了一个总体速率定律，可以写为

$$\frac{DF}{Dt} = G \cdot \mathcal{R}(P_{mh}) \cdot \mathcal{P}(P) \cdot \mathcal{F}(F). \quad (2)$$

单独来看，每个组成部分函数如下。首先， $\mathcal{R}$ 只是一个标准对数正态 CDF 的 $1/3$ 次幂：

$$\mathcal{R}(P_{mh}) = \Phi^{1/3} \left(\frac{\ln P_{mh} - \ln P_\mu}{\sigma} \right) \quad (3)$$

其中

$$\Phi(x) = \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{2}} \right) \right], \quad (4)$$

并且 P_μ 和 σ 是描述 HE 热点敏感性的模型参数。 $1/3$ 次幂仅仅来自于它在方程 (1) 中表面积与体积比的出现。这个指数可能看起来违反直觉，但请注意，相对于时间而言，速率仍然是一阶的 Φ ；立方根是因为我们将速率写为 F 的函数，而不是 t 。

给定强度为 P_{mh} 的通过冲击波和潜在热点的数量密度 χ ，实际活跃热点的数量密度 χ_* 就是

$$\chi_* = \chi \mathcal{R}(P_{mh}). \quad (5)$$

如上所述的压力标度函数仅为

$$\mathcal{P}(P) = \left(\frac{P}{P_0} \right)^b \quad (6)$$

其中 P_0 只是一个参考压力。在先前的工作¹中，我们选择了 $P_0 = P_{CJ}$ ，这既有优点也有缺点，因为 CJ 压力不一定为人所熟知。这个选择使得可以将介观火焰传播速度 u 与其在 CJ 点的值联系起来：

$$u = u_{CJ} \mathcal{P}(P). \quad (7)$$

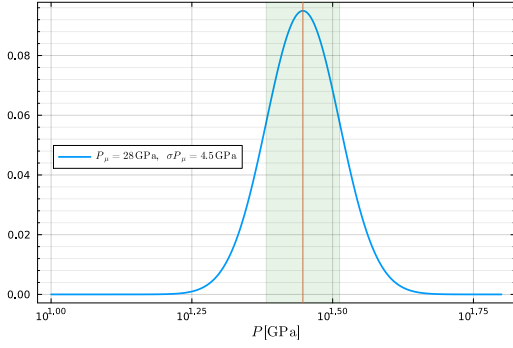


图 1. 热点敏感度的样本对数正态概率密度函数。阴影区域是 $\pm 1\sigma = 0.15$ 。垂直红线是 P_μ 。

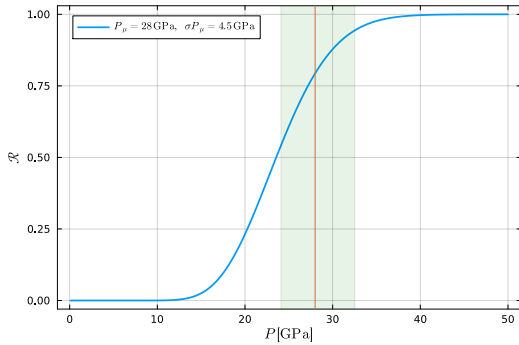


图 2. 样本初始化函数 $\mathcal{R}(P_{mh})$ 。阴影区域对应于图 (1) 中的阴影区域。垂直红线是 P_μ 。

这可能有助于尝试将模型参数与介观量联系起来，但这对于开发模型本身并不是真正必要的。

形因子函数 $\mathcal{F}$ 是

$$\mathcal{F}(F) = [-\ln(1 - F)]^{2/3} (1 - F) \quad (8)$$

并且没有自由参数，直接从几何和统计中导出。

最后，正如我们可以声称对 CJ 点的爆燃速度 u_{CJ} 不了解一样，我们不需要知道潜在热点的实际数密度 χ ，但我们可以将整体前因子 G 与乘积 $\chi^{1/3} u_{CJ}$ 相关联：

$$G = (36\pi)^{1/3} \chi^{1/3} u_{CJ}. \quad (9)$$

在实际操作中，当然，通常不会试图测量 χ 或 u_{CJ} ，而是仅仅在模拟拟合实验的过程中为 G 采用一个值。通常情况下，对于 PBX 9502，我们发现大约 $50 \mu s^{-1}$ 数量级的 G 值效果良好。

在某些情况下，将参考压力 P_0 (例如 P_{CJ}) 合并到速率常数 G 中可能更为方便。让我们在 G 和 $\mathcal{P}$ 上加上撇号，以表示这种写速率的替代方式，在这种方式中 $\mathcal{P}'(P) = P^b$:

$$\frac{DF}{Dt} = G' \cdot \mathcal{R}(P_{mh}) \cdot \mathcal{P}'(P) \cdot \mathcal{F}(F) \quad (10)$$

其中，用 GPa 测量 P ,

$$G' = (36\pi)^{1/3} \chi^{1/3} u_{CJ} P_0^{-b} \quad (11)$$

$$\approx 56 \text{ ms}^{-1} \text{ GPa}^{-b} \left(\frac{\chi}{10^9 \text{ mm}^{-3}} \right)^{1/3} \times \left(\frac{u_{CJ}}{10 \mu\text{m} \mu\text{s}^{-1}} \right) \left(\frac{P_{CJ}}{30 \text{ GPa}} \right)^{-b} \quad (12)$$

把这一切汇总起来，我们得到的是

$$\frac{DF}{Dt} = G \Phi^{1/3} \left(\frac{\log P_{mh} - \log P_\mu}{\sigma} \right) \times \left(\frac{P}{P_0} \right)^b [-\log(1 - F)]^{2/3} (1 - F) \quad (14)$$

或者，在实际应用中，将 P_0 吸收进 G' ，并用红色突出显示自由参数，

$$\frac{DF}{Dt} = G' \Phi^{1/3} \left(\frac{\log P_{mh} - \log P_\mu}{\sigma} \right) \times P^b [-\log(1-F)]^{2/3} (1-F) \quad (15)$$

我们所描述的，简而言之，是萨利纳斯反应流率模型，该模型我们在 2016 年中期开发，并在 2016-2017 年间于 LLNL 使用 ALE 水力代码面积进行了测试。它有四个自由参数 $-G', P_\mu, \sigma, b$ 。（但请注意，在实际操作中，到目前为止的所有工作中我们都固定了 $b = 2$ ，并且只变动剩下的三个参数。）事实证明，经过仔细检查，这个模型与 Menikoff 和 Shaw (2010) 提出的 SURF 模型² 非常相似。

主要影响因素

Souers 等人 (2004) 在研究 TATB 基的 IHE LX-17 的拐角转向时指出³，“我们的结论是，失效建模需要一个单独的软件包，在反应流领域这是一个新的观点，并且并非每个人都接受这一观点。”在这里，我们描述了启发我们开发萨利纳斯的现有模型。

点火与增长

点火与生长 (I&G)^{4, 5} 是 LLNL 的主要反应流模型——事实上是最早的此类模型——拥有悠久的历史。

I&G 的主要反应速率定律将反应状态空间划分为三个不同的区域，可以以几种不同

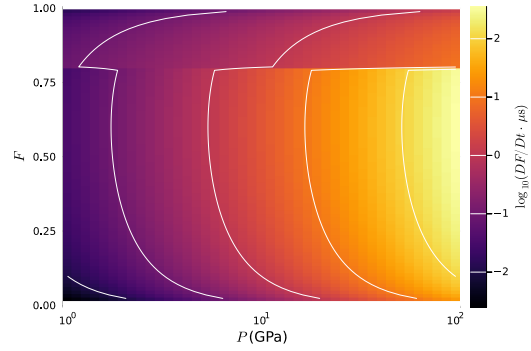


图 3. 点火与生长速率对于 LX-17（生长和完成项）。

方式书写，例如⁵，

$$\begin{aligned} \frac{DF}{Dt} = & I(1-F)^b \left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1 - a \right)^x \quad 0 < F < F_1 \\ & + G_1(1-F)^c F^d P^y \quad 0 < F < F_1 \\ & + G_2(1-F)^e F^g P^z \quad F_2 < F < 1 \end{aligned}$$

（关键的生长和完成速率定律参数用红色突出显示。）虽然重要，点火项（第一项）仅覆盖了整个 (F, P, ρ) 状态空间的一小部分，因为 F_1 通常相当小（例如 0.02）。该速率定律在这一范围之外——即增长和完成项之外——形式上为

$$\frac{DF}{Dt} = \sum_i G_i \cdot \mathcal{F}_i(F) \cdot \mathcal{P}_i(P). \quad (16)$$

其中求和遍历 F 的划分。

原则上，组合增长和完成项有十个自由参数，尽管实际上并非所有这些参数都能被充分利用。例如，Tarver 提供了 $F_1 = F_2$ 和 $c = e = g$ 用于基于 TATB 的 IHE LX-17⁵ 冰球实验。然而，不能认为参数空间少于至少七维。这是一个优点，因为它为建模者提供了灵活性以拟合非常广泛的实验。另一方面，

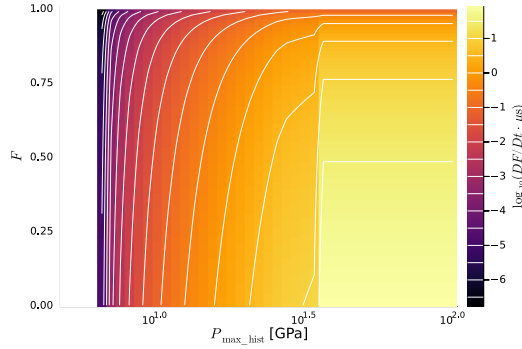


图 4. 在 (P_{mh}, F) 切片的 (P, P_{mh}, F) 状态空间中的比率，对于 Tarantula 2011，针对 $P = P_{mh}$ 。

尚未看到是否可以在相同的参数设置下做到这一点，这正是理想情况下想要的。

塔伦泰拉 2011

Salinas 模型受到了 JWL++ Tarantula 2011 [JT11] 的严重影响，后者既快速又相对容易地适应转角。在 JT11 中，速率是三维状态空间 (P_{mh}, P, F) 的函数。除了钝化（此处不考虑）之外，JT11 模型的速率定律可以写作

$$\frac{DF}{Dt} = \begin{cases} 0, & P < P_0 \\ G_1 (P_{mh} - P_{o1})^{b_1} (1 - F)^{c_1}, & P_0 \leq P < P_1 \\ G_2 (P_{mh} - P_{o2})^{b_2} (1 - F)^{c_2}, & P_1 \leq P < P_2 \\ G_3 (P_{mh} - P_{o3})^{b_3} (1 - F)^{c_3}, & P_2 \leq P \end{cases}$$

从原则上讲，这个速率定律似乎有 15 个自由参数。实际上， $b_3 = 0$ ， $c_1 = c_2 = 1$ ， $P_{o1} = P_{o2} = P_{o3} = P_0$ 。最终，有人可能会争辩说自由参数的数量可以低至 8 个 $(G_1, G_3, b_1, b_2, c_3, P_0, P_1, P_2)$ 。（请注意， G_1 和

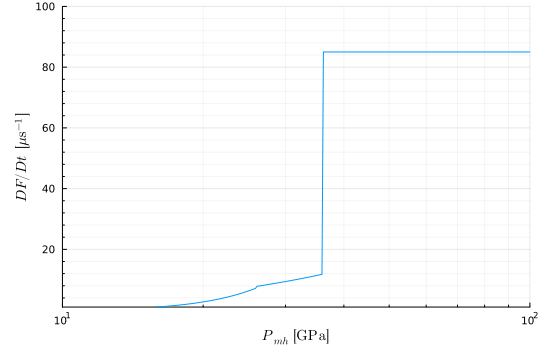


图 5. 2011 年狼蛛中的比率，对于 $F = 0$ 和 $P = P_{mh}$ 。

G_2 不是独立的，因为它们似乎是被选用来保证当 $P = P_{mh}$ 时速率定律的连续性。）

更大的担忧是前述的不连续性（见图 5，7）。请注意，在使用参数值⁶时，速率表现出强烈的不连续性，在 P_2 处不仅有一个大的阶跃函数跳跃，而且在 P_0 和 P_1 处也有跳跃，在（潜在的）初始冲击之后。根据计算流体动力学的经验，数值方法并不总是与速率定律中突然的阶梯状变化兼容。

此外，当 $P < P_{mh}$ 固定时，该速率相对于 P 并不总是单调的。这可以通过在固定 F 的完整 P_{mh}, P, F 状态空间的一个切片中可视化速率定律来观察。由于定义， $P \leq P_{mh}$ ，在任何固定的 F 下，速率定律仅占据 P_{mh}, P 平面的一半空间，在图上表现为一个三角形区域；参见图 (6) 中的 $F = 0.5$ 。

这种单调性的缺乏可能在我们设想初始冲击波已经通过的情况下表现得非常明显，我们将速率作为 P 的函数来展示，对应不同 F 的范围。假设一个完全发展的爆震波，其冯·诺依曼尖峰约为 50 GPa（请注意，我们并不是声称 PBX 9502 的实际冯·诺依曼尖峰是 50 GPa；确切的值在这个练习中并不重要，只要它远高于 CJ 压力即可）。

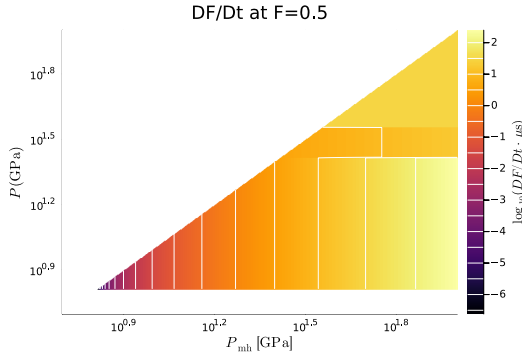


图 6. 2011 年狼蛛的比率，对于 $F = 0.5$ 。

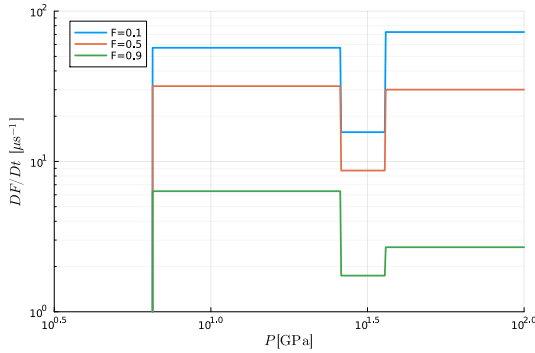


图 7. 2011 年在狼蛛中，对于 $P_{mh} = 50$ GPa 的速率。

可以看出，不仅速率相对于 P 是非单调的——这意味着，在反应区如果不进入 Taylor 波，则随着压力下降，实际反应速率会向上——而且实际上对于 $F > 0.5$ ，速率在初始区域 ($P_0 < P < P_1$) 比在爆轰区域 ($P > P_2$) 更高。

这可能是我们在尝试运行 JWL++ Tarantula 2011 时遇到的持续不稳定性的解释。我们遇到的一个实例是带有轻微约束的速率杆，导致沿速率杆距离的部分燃烧和完全燃烧交替带状分布。我们还遇到了在膨胀（弯曲）爆震波中的不稳定性，这些区域也特征化为不完全燃烧。这可能是模型基础文献⁶中看到某些“波浪”特征的解释；参见图 (8)。

尽管如此，值得注意的是，使用将 P_{mh} 作为关键现象状态量的模型成功捕捉到了拐角转变，这一状态量强烈影响了初始冲击后的燃烧过程。还值得一提的是，虽然一般来说速率定律是 F, P, P_{mh} 的一个复杂函数，但在峰值冲击压力即。上升的过程中，当 $P = P_{mh}$ 时，它可以简单地写成

$$\frac{DF}{Dt} = G \cdot \mathcal{R}(P_{mh}) \cdot \mathcal{F}(F) \quad (17)$$

。这启发我们考虑将其推广到假设

$$\frac{DF}{Dt} = G \cdot \mathcal{R}(P_{mh}) \cdot \mathcal{P}(P) \cdot \mathcal{F}(F) \quad (18)$$

，这就是 Salinas 的基础。

猎豹 + pqplf2

我们从中汲取灵感的另一个模型是劳伦斯利弗莫尔国家实验室中能源材料组用来研究 ECOT 的模型，该实验是在洛斯阿拉莫斯国家实验室⁷开发的。该模型使用了 CHEETAH 热化学代码⁸，并通过调用 CHEETAH 例程序 *pqplf2*¹⁰ 来利用分段线性速率定律。

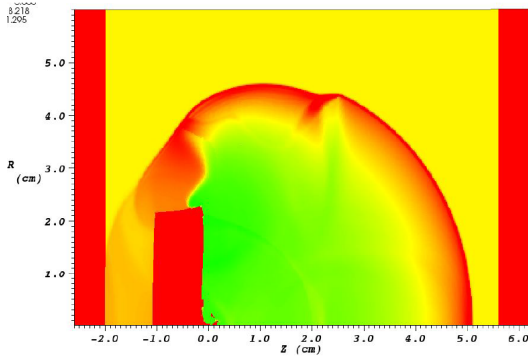


图 8. 图 8a 来自 Souers、Haylett 和 Vitello (2011) ⁶, 显示了在接近 $z = 2.5 \text{ cm}$, $R = 4.0 \text{ cm}$ 的膨胀爆震波中燃烧可能存在的 不稳定。

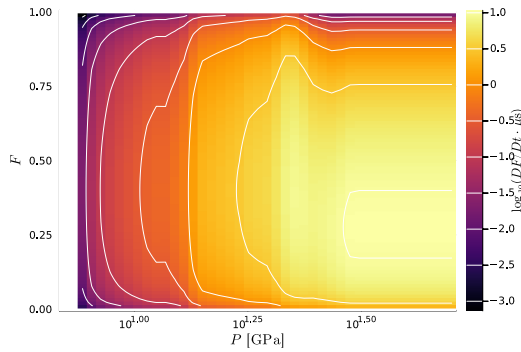


图 9. 示例速率在 (P, F) 状态空间中的 *pqplf2* 速率定律。

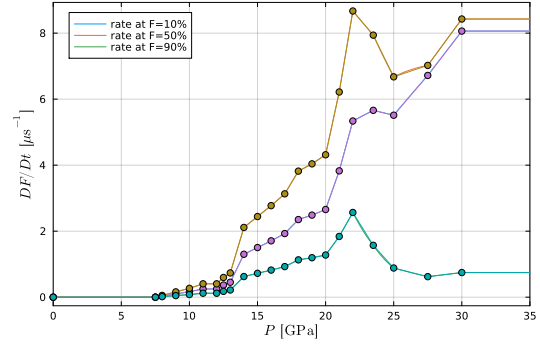


图 10. 示例速率与 P 对于 $F = 0.1, 0.5, 0.9$ 的 *pqplf2* 速率定律 (模型 1.29/2017)。

利率被写为

$$\frac{DF}{Dt} = f(P) \cdot (1 - F)^{1+C(P)} F^b \quad (19)$$

但现在 f 和 C 是 P 的分段线性函数。这些曲线通过一个包含大约 20–25 个指标值 P_i 的表格来指定, 在这些值处有 20–25 个表列值 f_i 和 20–25 个表列值 C_i 。表面上看, 这表明自由参数的数量在 61 (20+20+20+1) 到 76 (25+25+25+1) 之间。事实上, P_i 的间距在大部分区域内是均匀的, 而且大多数 C_i 在大约 23 GPa 以下都被认为是 0, 因此有效自由参数的数量显著降低, 低至三十多个左右。尽管如此, 这个数量仍然不算小。

这与我们拥有的计算资源相结合时就成为一个问题, 因为对于我们来说, 单次运行与 ECOT (例如) 进行比较大约需要 8 个小时。这意味着实际上不可能对参数空间进行任何系统的探索以找到针对单个实验的最佳拟合, 更不用说一组不同的实验了。

这启发我们思考是否可以开发一个模型, 一方面像 JWL++ Tarantula 2011 一样快速, 但同时稳定且自由参数更少。

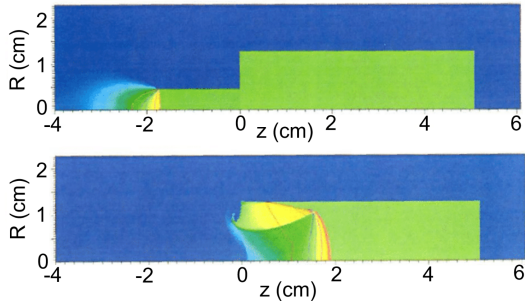


图 11. ECOT 模拟中使用 Salinas 的燃烧中间阶段。

结果

我们能够在多种实验中运行 Salinas。完整的实验系列 (ECOT, SCOT, DAX, SAX) 在 Williams (2020)¹ 中有描述。ECOT 的模拟可以在图 (11) 中看到。SAX 的模拟可以看到在图 (12) 中。

不幸的是，我们不再拥有展示 Salinas 与 ECOT、SCOT、DAX 或 SAX 的实验数据拟合情况的数据。然而，我们欢迎任何可能的机会将 Salinas 整合到其他反应流流体动力学代码中，以便我们可以进一步对模型进行工作，并在一系列实验中证明其准确性，包括但不限于 PBX 9502 的转角实验。

致谢

作者感谢 Edward L. Lee 和 K. Thomas Lorenz 的鼓励。

参考文献

1. Williams, P. T., “A Simple Reactive Flow Model for Corner-Turning in Insensitive High Explosives, Including Failure and Dead Zones. I. The Model,” *Propellants, Explos., Pyrotech.*, Vol. 45, pp. 1506 –

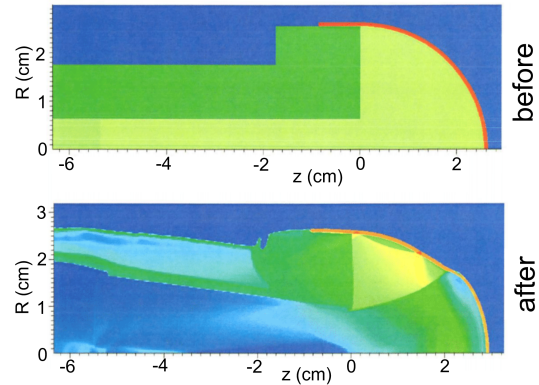


图 12. SAX 使用 Salinas 进行模拟的燃烧中间阶段。

1522, 2020.

2. Menikoff, R. and Shaw, M. S., “Reactive burn models and ignition & growth concept,” *EPJ Web Conf.*, Vol. 10, p. 00003, 2010.
3. Souers, P. C., Andreski, H. G., III, C. F. C., Garza, R., Pastrone, R., Phillips, D., Roeske, F., Vitello, P. and Molitoris, J. D., “LX-17 Corner-Turning,” *Propellants, Explos., Pyrotech.*, Vol. 29, pp. 359 – 367, 2004.
4. Lee, E. L. and Tarver, C. M., “Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives,” *Phs. Fluids (1958-1988)*, Vol. 23, p. 2362, 1980.
5. Tarver, C. M., “Ignition and Growth Modeling of LX-17 Hockey Puck Experiments,” *Propellants, Explos., Pyrotech.*, Vol. 30, pp. 109 – 117, 2005.
6. Souers, P. C., Haylett, D. and Vitello, P., “TARANTULA 2011 in JW++,”

Technical Report LLNL-TR-509132,
Lawrence Livermore National Laboratory, 2011.

7. Hill, L. G. and Salyer, T. R., “The Los Alamos Enhanced Corner-Turning (ECOT) Test,” in “16th International Detonation Symposium, July 15 – 20,” Cambridge, MD, USA, 2018.
8. Fried, L. E. and Souers, P. C., “CHEETAH: A Next Generation Thermochemical Code,” *Technical Report UCRL-ID-117240*, Lawrence Livermore National Laboratory, 1994.
9. Souers, P. C., Anderson, S., Mercer, J., McGuire, E. and Vitello, P., “JWL++: A Simple Reactive Flow Code Package for Detonation,” *Propellants Explos. Pyrotech.*, Vol. 25, p. 54, 2000.
10. Kuo, I.-F. W., Vitello, P., Fried, L. E., Bukovsky, E. V. and Lorenz, K. T., “Reactive Flow Modelling of Small Scale Corner Turning Experiments,” in “16th International Detonation Symposium, July 15 – 20,” Cambridge, MD, USA, 2018.