

高性能爆薬に関する反応領域圧力計算のモデリング(第1報)

久保田士郎*, 島田英樹*, 松井紀久男*, 永山邦仁**

爆轟生成ガスの状態式と未反応固体爆薬の状態式を用いた反応領域圧力の近似計算において求められるガス成分ならびに未反応成分の比体積の関係は爆薬の反応率にほとんど依存しないことを見出した。この関係を応用して、高性能爆薬に関する反応領域圧力計算のための新しい計算手法を提案する。あらかじめ両成分の比体積の関係を求め、それを適当な関数にて近似し、その近似式を反応領域圧力計算に導入することにより、一般的に行われる両成分の状態式をも含んだ複雑な繰り返し計算が不要となり、計算が単純化されることを示す。さらにPBX 9404ならびにPETNに対して衝撃起爆問題を提案する方法で解き、その有効性について議論する。

1. はじめに

爆薬の衝撃起爆に関する研究は古くから重要視され、1940年代から現在にいたるまで数多くの研究業績が挙げられている。von NeumannとRichtmyer¹⁾により擬似粘性項が流体力学計算に導入されると、特別な境界条件なしに衝撃波の不連続面を計算することが可能となり、HubbardとJohnson²⁾による一次元流体力学コードを用いた衝撃起爆の数値解析にも取り入れられた。初期の衝撃起爆計算では反応速度則としてArrhenius型³⁾のモデルが用いられているが、特に非均質系の固体爆薬に関する衝撃起爆実験技術の急速な進展に伴い、それらの実験結果をよく説明できるような反応モデルが提案された⁴⁾⁶⁾。その中で現在、最も広く数値解析に取り入れられている反応モデルの一つがLee-Tarver⁶⁾⁷⁾モデルである。衝撃起爆におけるignition & growthの考え方を取り入れたこのモデルについては、多くの固体爆薬についてそのパラメータが求められると同時に実験結果とのよい一致が示されている。

数値解析において反応領域の状態量の関係を与える

2001年4月24日受付

2001年7月6日受理

*九州大学大学院 工学研究院 地球資源システム工学部門

〒812-8581 福岡市東区箱崎6-10-1

TEL 092-642-3626

FAX 092-642-3614

E-mail kubota@mine.kyushu-u.ac.jp

**九州大学大学院 工学研究院 航空宇宙工学部門

〒812-8581 福岡市東区箱崎6-10-1

TEL 092-642-3804

FAX 092-642-4143

E-mail nagayama@aero.kyushu-u.ac.jp

ために、爆轟生成ガスと未反応固体爆薬の状態方程式が必要となる。爆轟生成ガスの状態式についてはその組成をもとにモデル化されたものが1940~1950年代後半にかけて多く提案された⁸⁾ものの、衝撃起爆に関する初期の数値解析的研究において用いられていたのは理想気体の状態式であった。その後、上述したモデルに改良が加えられ、コンピューター機器の急速な発展に伴って、BKW⁹⁾、KHT¹⁰⁾、LJD³⁾状態式等のコード化も行われるようになった。一方、現在でも最も頻繁に使用される状態式の一つであるJWL状態式^{11)~13)}が1960年代にLLNLの研究グループによって提案された。この状態式は、そのパラメータがCylinder testと呼ばれる実験結果をモデル解析することにより求められるため、パラメータを得るために爆轟生成ガスの組成に基づく化学平衡計算が不要であり、爆轟生成ガスの組成が不明瞭な産業用の爆薬にもよく用いられる。Campbellら¹⁴⁾やSeayとSeely¹⁵⁾等の多くの研究者によって、楔形の爆薬試料を用いた衝撃起爆実験が行われるようになると、衝撃起爆過程を解明するために重要となる種々のデータが得られるようになった。この実験はWedge testと呼ばれ、固体爆薬のHugoniotあるいはPop plot³⁾¹⁶⁾と呼ばれる衝撃起爆誘導距離と入射圧力との関係を得るための重要な実験であり、現在までに多くの爆薬について実験データが公表されている。

衝撃起爆を含む数値解析において、反応領域の状態量の計算は必要不可欠であり、よく採用される爆轟生成ガスならびに未反応爆薬成分から近似的に求める方法¹⁷⁾の基本概念は非常に単純である。衝撃起爆問題で重要となる反応速度則、爆轟ガスならびに未反応固体

爆薬に対する各々の状態方程式に関する研究は数多くある。しかしながら、反応領域計算において、爆轟ガス成分および未反応成分の状態量まで含めて詳細に議論した研究は見当たらない。

我々は反応領域計算において、爆轟ガス成分ならびに未反応成分の状態量について調べた。その結果、両成分の比体積の関係は反応率に対する依存性が極めて少ないことを示す。すなわち、比体積ならびに内部エネルギーをそれぞれ V, E 、爆轟ガス成分および未反応成分をそれぞれ添え字 r, u で表すと、両比体積の関係は反応率によらず $V_u - V_r$ 面上にてほとんど単一線上にプロットできるという極めて興味深い関係があることを示す。つぎに、 $V_u - V_r$ の関係を適当な関数にて近似し、その近似式を反応領域圧力計算に導入する新しい計算手法を提案する。本方法を導入することにより、一般的に行われる両成分の状態式をも含んだ複雑な繰り返し計算が不要となり、計算が単純化されることを示す。さらに反応速度則として Lee-Tarver モデル、状態方程式に JWL 状態式を採用し、提案する反応領域の計算手法を用いて、PBX 9404 ならびに PETN に対して衝撃起爆問題を解き、その有効性について議論する。

2. 反応領域の圧力評価

衝撃起爆過程の数値解析において、反応領域の状態量の計算は爆轟生成ガスの状態式と未反応固体爆薬の状態式により近似的に求める方法が一般的に採用される¹⁷⁾。流体力学に基づく計算コードにおける流れは次のとおりである。まず、保存則をもとに比体積、内部エネルギー、粒子速度が決定された後、反応速度則により反応率(生成ガスの質量分率 λ で表す。 $\lambda = 0$ は未反応爆薬、 $\lambda = 1$ で反応完了)が決定される。次に、ガス成分ならびに未反応成分のそれぞれの比体積 (V_r, V_u)、内部エネルギー (E_r, E_u) の 4 変数を未知数として圧力平衡等の条件のもとに繰り返し計算が行われる。通常使用されるのは以下の式である。

$$(1-\lambda)V_u + \lambda V_r - V = 0 \quad (1)$$

$$(1-\lambda)E_u + \lambda E_r - E = 0 \quad (2)$$

$$P_u - P_r = 0 \quad (3)$$

V, E はそれぞれ計算対象となるセルの比体積、内部エネルギー、 P は圧力を示す。未知数は 4 つであるから、解を求めるためにさらにもう一つ式が必要である。以下のような関係がよく取り上げられる。1) 温度平衡の条件、2) 固体爆薬の等エントロピーの関係を導入する方法¹⁷⁾、3) ガスと固体の混合相を計算するために Mader により提案された評価法³⁾ (HOMSG) を

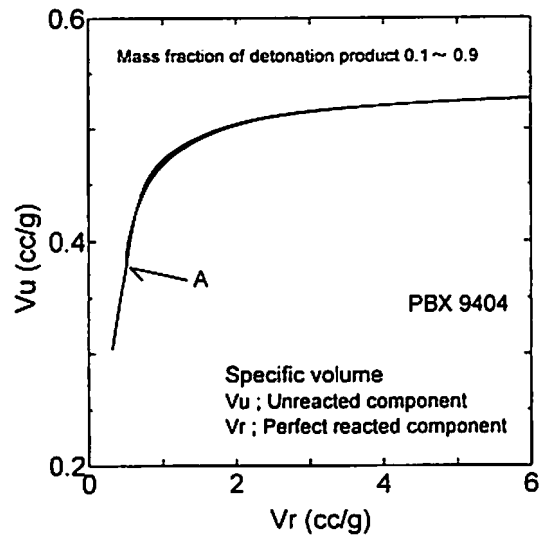


Fig. 1 P-V relations of perfect reacted, intermediate and unreacted phases for PBX9404

用いる方法等である。4 つの式が揃っても複雑な状態方程式を含むために簡単に解は得られず、 V_u と V_r を未知変数として (3) 式を満足する圧力 $P (P = P_u = P_r)$ が得られるまで、状態式を毎回含むような反復計算を行う必要がある。

本研究では取り扱いが最も簡単である HOMSG を採用し、反応領域圧力計算のための EOS プログラムを作成した。そのプログラムを用いて反応相圧力と比体積の関係あるいは $V_r - V_u$ の関係を求め、その関係について検討した。PBX9404 の圧力と比体積の関係を Fig. 1 に示す。ただし、点線は爆轟ガス成分、破線は未反応成分を示しており、内部エネルギーをそれぞれ各成分の初期値とした等エネルギー線を示す。実線は上述した両成分の中間の状態(反応混合相)であり、 λ を 0.1 刻みとして、0.1 ~ 0.9 の範囲で 9 本の実線が引かれている。

3. 反応速度則と状態方程式

本研究で採用した反応速度則ならびに状態方程式について説明する。反応速度則として採用したのは Lee-Tarver モデルある。このモデルには種々の形式のものが提案されているが次式のような形式を採用した。

$$\frac{d\lambda}{dt} = I(1-\lambda)^{2.9} \eta^{4.0} + G(1-\lambda)^{2.9} \lambda^{2.3} P^z \quad (4)$$

ここで、 P は圧力、 $\eta = V_u/V_r - 1$ 、 z, G, I は定数である。PBX-9404 についてパラメータを Table 1 に示す。生成ガスの状態式は JWL 状態式を、未反応固体爆薬の状態式は Hugoniot 曲線を JWL 式でフィット

Table 1 Reaction rate parameters of PBX-9404

Explosive	$I(\mu s^{-1})$	$G(\mu s^{-1} Mbar^{-2})$	Z
PBX-9404	44.0	800	2.24

Table 2 JWL parameters of PBX-9404

PBX-9404	A(Mbar)	B(Mbar)	R_1	R_2	ω
Perfect reacted	8.524	0.1802	4.6	1.3	0.38
Unreacted	69.69	-1.727	7.8	3.9	0.86

したものを用いた。JWL状態式は次式で表せる。

$$P = A \left(1 - \frac{\omega}{R_1 \zeta}\right) \exp(-R_1 \zeta) + B \left(1 - \frac{\omega}{R_2 \zeta}\right) \exp(-R_2 \zeta) + \frac{\omega}{\zeta} E \quad (5)$$

ここで $\zeta = V/V_0$ であり、添え字0は未反応固体爆薬の状態を示す。A, B, R_1 , R_2 , ω のパラメータは定数である。Table 2に状態方程式のパラメータを示す。数値計算はSINコード¹⁸⁾を参考にして作成したLagrange系の1次元プログラム¹⁹⁾を用いて行った。

4. 反応領域におけるガス成分ならびに未反応成分の比体積の関係

Fig. 1で示した反応領域における9本のP-V線について、対応するすべての V_r-V_u の関係をプロットしたものがFig. 2である。2節で説明したように、繰り返し計算を要する複雑な計算であるにもかかわらず、両比体積の関係は意外にも反応率によらず V_u-V_r 面上にてほとんど単一線上にプロットされている。たとえば、両成分の内部エネルギーの関係を E_u-E_r 面上にプロットした場合、反応率を変化させれば、変化させた数だけ異なる線が引ける。Fig. 2は V_r と V_u の関係は反応率にはほとんど依存しないことを示しており、 V_r と V_u は簡単な関数で近似できる可能性がある。このことにより次の興味深い二つの検討課題を挙げることができる。一つは、 V_r と V_u との関係が反応率にはほとんど依存しないことの物理的な解釈であり、もう一つは V_r と V_u とをある関数で関係づけ、反応領域の状態量計算へ応用する試みである。前者は現在、考察中であり今後の検討課題とすることとし、数値解析の際に実用的な後者について議論を進めることにする。

反応領域計算において、未反応成分の比体積は最大で V_0 であると仮定したため、Fig. 2の曲線は $V_u=V_0$ に漸近するような曲線になった。しかしながらその仮

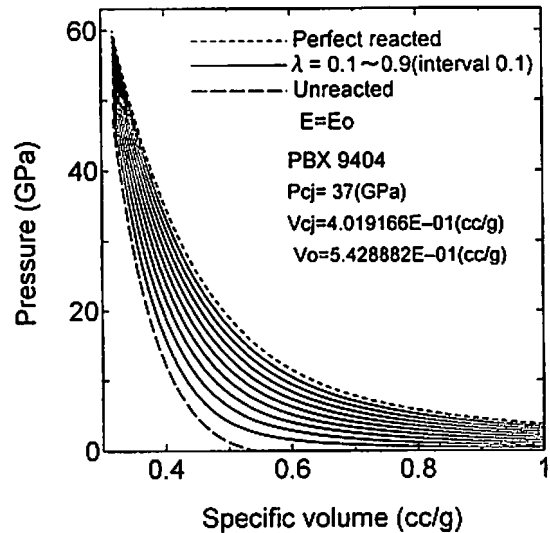


Fig. 2 Relationship of specific volumes between unreacted and perfect reacted components obtained by mixture EOS (PBX9404)

定は $V_u=V_0$ 近傍以外ではFig. 2の曲線に影響を与えず、さらにその仮定は未反応固体成分が初期の比体積以上は膨張できず、そのような条件下では初期状態のまま反応領域に散在するとすれば、考えうるものである。

Fig. 2において示された V_r-V_u の関係には曲率が顕著に変化する点(図中A点)が確認され、単一の関数で近似することは困難であることが容易に予測されるため、点Aを境界として二つの関数で近似することにする。点Aに対して左側を線形近似、右側を次式で表すような関数で近似する。

$$V_u = V_0 - \sum_{i=1}^3 a_i \exp(-b_i V_r) \quad (6)$$

ただし、 a_i , b_i は、点Aを通る束縛条件のもとに非線形フィッティング²⁰⁾を用いて求められる定数である。左側の線形近似部分の関数を決定するためには少なくとも2点を特定する必要がある。一つの点は点AでありこれはFig. 2により求めた。もう一つの点はP-V面の高密度側にてガス成分(Fig. 1点線)と未反応成分(Fig. 1破線)が交差する点とした。Table 3に近似関数の定数を、Fig. 3に V_r-V_u の近似曲線を示す。

V_r-V_u の近似曲線が求められると、それらの近似式と式(1)のみにより、任意の V_r 、反応率に対して、 V_r-V_u が唯一求まる。2節で説明した反応領域の計算手法はいずれの場合も、 E_u , E_r は V_r , V_u のみの関数に整理できるため、 V_r , V_u が決定されれば、反応領域の圧力が評価可能である。通常繰り返し計算の中で毎回、ガス成分と未反応成分ともに状態式を計算する必

Table 3 Curve fitting parameters for V_u-V_r relation

a_1 (cc/g)	a_2 (cc/g)	a_3 (cc/g)	b_1 (g/cc)	b_2 (g/cc)	b_3 (g/cc)
4.6401	0.1700	0.01802	8.001	0.9632	0.06904

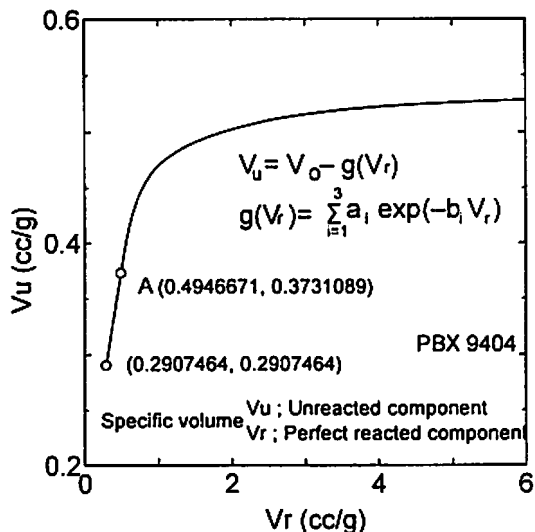


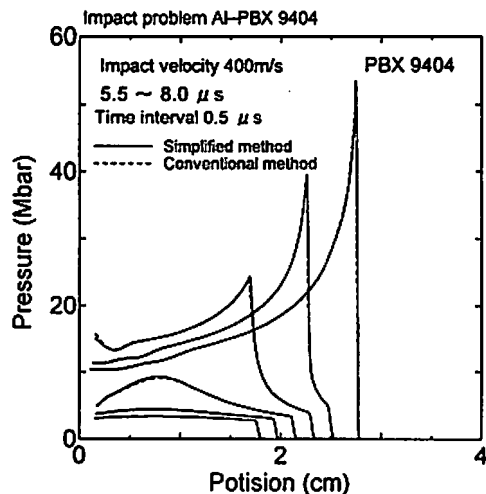
Fig. 3 Relationship of specific volumes between unreacted and perfect reacted components obtained by fitting functions (PBX 9404)

要があるが、本方法を用いれば、式(1)と近似式のみで V_r , V_u が得られてしまうため、計算アルゴリズムが簡単になるばかりでなく、計算時間は短縮される。

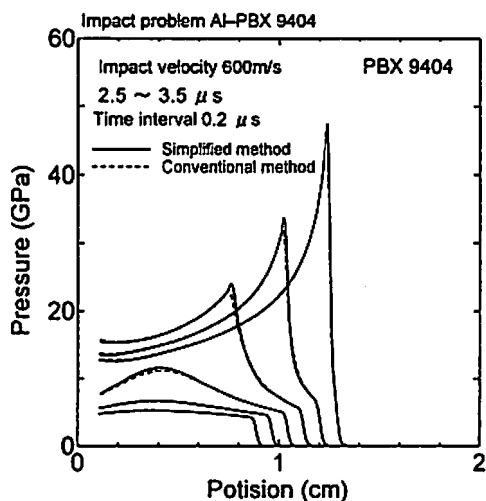
5. 衝撃起爆問題への応用例

前節で説明した V_r-V_u の関係式を用いて実際の衝撃起爆問題を解き、従来の方法にて得られる結果と比較することによりその有効性を検討する。衝撃起爆問題として Al 板(厚み 2 cm)と爆薬との一次元衝突問題を取り上げた。ただし、固体に近い状態で V_r-V_u の関係について単一線からの若干のずれが確認されたために、本報で提案する手法は $\lambda \geq 0.1$ について適用し、 $\lambda < 0.1$ は通常の方法とした。この詳細についてはここでは取り上げず、稿を改めて議論する。

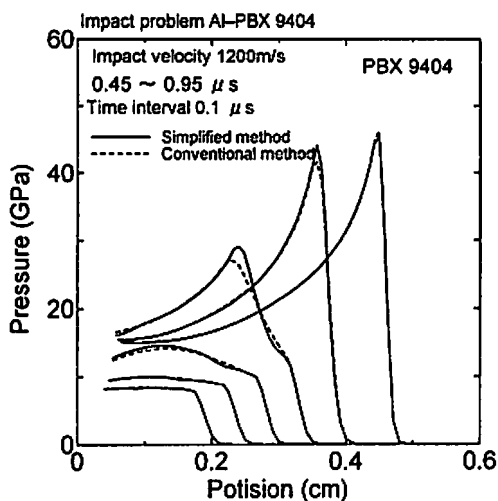
Fig. 4 (a)~(c)に衝突速度がそれぞれ 400, 600, 1200 ms^{-1} の場合について PBX9404 中の衝撃波伝播過程を示す。同図において横軸は初期の衝突界面を 0 とした位置を示しており、爆薬中圧力分布の時々刻々の変化を示している。圧力分布は各図中左上の時間範囲について示されており、時間は衝突時を 0 としてカウントされたものである。Fig. 5 は PETN ($\rho_0 = 1.75 \text{ gcm}^{-3}$) に 600 ms^{-1} で Al 板が衝突する場合の計算例である。Fig. 4 と Fig. 5 において、実線が V_r-V_u の近似式を反応領域の計算に用いたもので、点線は従来の方



(a) Impact velocity; 400 ms^{-1}



(b) Impact velocity; 600 ms^{-1}



(c) Impact velocity; 1200 ms^{-1}

Fig. 4 Calculated shock initiation process in PBX 9404 with various impact velocity

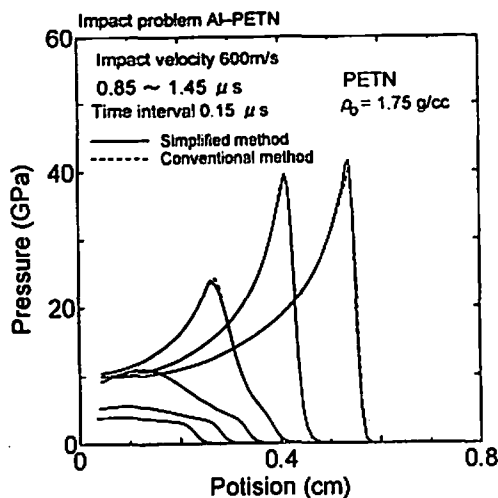


Fig. 5 Calculated shock initiation process in PETN ($\rho_0 = 1.75 \text{ g/cc}$)

法により得られた結果を示す。衝突速度の違い、起爆される薬種の違いによらず、両者の計算結果には極めて良い一致が確認される。以上の結果より $V_r - V_d$ の近似式を用いた反応領域の計算は通常の計算手法で得られる結果を再現可能であり、衝撃起爆計算に有効に適用可能である。

6. まとめ

反応領域の状態量計算において得られる爆轟ガス成分と未反応爆薬成分の関係は、反応率によらず $V_r - V_d$ 面上にてほとんど単一線上にプロットできることを示した。 $V_r - V_d$ の関係を適当な関数にて近似し、その近似式を反応領域圧力計算に導入する新しい計算手法を提案した。さらに、本方法の有効性を検討するため、衝撃起爆問題を提案した方法ならびに従来の方法で解き、両者の結果を比較した。その結果、 $V_r - V_d$ の近似式を用いた反応領域の計算は通常の計算手法で得られる結果を再現可能であり、衝撃起爆計算に有効に適用可能であることが示された。

謝 辞

本研究の一部は平成12年度(財)火薬工業技術奨励会研究助成金により実施した。ここに記して謝意を表す。

文 献

1) J. von Neumann and R. D. Richtmyer, *J. Appl.*

- Phys.*, 21, 232(1950)
- 2) H. W. Hubbard and M. H. Johnson, *J. Appl. Phys.*, 30, 765(1959)
- 3) C. L. Mader, "Numerical Modeling of Detonations", (1979), University of California Press
- 4) C. A. Forest, LASL report, LA-7245(1978)
- 5) C. L. Mader and C. A. Forest, LASL report, LA-6259(1976)
- 6) E. L. Lee and C. M. Tarver, *Phys. Fluids*, 23, 2362(1980)
- 7) C. M. Tarver and J. O. Hallquist, Proc. 7th Symposium (International) on Detonation, pp 488-497(1981)
- 8) 疋田強, 工業火薬協会誌, 13, 17(1952)
- 9) C. L. Mader, LASL report, LA-3704(1967)
- 10) K. Tanaka, Proc. 8th Symposium (International) on Detonation, pp 548-557(1985)
- 11) J. W. Kury, H. C. Hornig, E. L. Lee, J. L. McDonnell, D. L. Ornellas, M. Finger, F. M. Strange and M. L. Wilkins, Proc. 4th Symposium (International) on Detonation, pp 3-13(1965)
- 12) E. Lee, M. Finger, W. Collins, LLNL report, UCID-16189(1973)
- 13) H. Hornberg and F. Volk, *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 14, 199(1989)
- 14) A. W. Campbell, W. C. Davis, J. B. Ramsay and J. R. Travis, *Phys. Fluids*, 4, 511(1961)
- 15) G. E. Seay and L. B. Seely, *J. Appl. Phys.*, 32, 1092(1961)
- 16) J. B. Ramsay and A. Popolato, Proc. 4th Symposium (International) on Detonation, pp 233-238(1965)
- 17) J. N. Johnson, P. K. Tang and C. A. Forest, *J. Appl. Phys.* 57, 4323(1985)
- 18) C. L. Mader and W. R. Gage, LASL report, LA-3720(1967)
- 19) 久保田士郎, 島田英樹, 松井紀久男, 加藤幸夫, 高橋勝彦, 吉田正典, 劉志躍, 伊東繁, 火薬学会誌, 62, 57(2001)
- 20) P. R. Bervington, Data redaction and error analysis for the physical science"(1969), McGraw Hill, New York

Modeling of pressure calculation in reaction zone of high explosive (I)

Shiro KUBOTA*, Hideki SHIMADA*, Kiko MATSUI*,
and Kunihito NAGAYAMA**

We found that the relation of specific volumes between perfect reacted and un-reacted components of high explosive, which is obtained from the calculation of pressure in reaction zone using equation of states of these components, show very little dependence on the reaction degree of high explosive. Utilizing this property, we propose new simplified method on the pressure calculation in reaction zone of high explosive. In advance, the relationship of these volumes was calculated using mixture equation of state and was fitted to the results by means of a fitting function. Owing to introduce the function into the pressure calculation, the iterative calculation that includes both of equation of states for these components in every time is unnecessary. As the results, the pressure calculation becomes greatly simplified than conventional method. We calculated the shock initiation process of PBX 9404 and PETN and discussed the validity of the proposed method.

(*Department of Earth Resources Engineering, Faculty of Engineering, Kyushu University,
6-10-1, Hakozaki, Higashi-ku, Fukuoka, 812-8581, JAPAN

**Department of Aeronautics and Astronautics, Graduate school of engineering, Kyushu
University, 6-10-1, Hakozaki, Higashi-ku, Fukuoka, 812-8581, JAPAN)

訂 正

火薬学会誌 320号 Vol.62, No.4

P. 156, 157 Fig. 1 と Fig. 2 が入れ替わってしまいました。

なお, キャプションはそのままです。

著者を始めとする関係者の方々には大変ご迷惑をお掛けいたしました。
謹んでお詫び申し上げます。

火 薬 学 会 誌

第62巻 第5冊 通巻321号



2001年10月25日印刷 (隔月刊)
2001年10月31日発行

定価: 国内 1,500円
海外 2,000円 (送料込み)

発行所 社団法人 火 薬 学 会
会長 田 村 昌 三

〒104-0028 東京都中央区八重洲2-7-7
八重洲旭ビル 6F 日本火薬工業会内
電 話 03 (3271) 6 7 1 5 ~ 7
F A X 03 (3271) 7 5 9 2
振替 00180-0-146724

西部支部

〒804-8550 北九州市戸畑区仙水町1-1
九州工業大学工学部物質工学科
応用化学コース内
電話/FAX 093 (884) 3 3 1 9

編集兼発行人 田 村 昌 三

編 集 部 東京大学大学院工学系研究科
化学システム工学専攻

〒113-8656 東京都文京区本郷7-3-1
電話/FAX 03 (5841) 7 4 8 8

E-mail: jes-edit@explosion.chem.t.u-tokyo.ac.jp

印 刷 所 (有)デジタル・プレス・ワークショップ結城
〒162-0801 東京都新宿区山吹町361
江戸川橋杉原ビルディング601
電 話 03 (3268) 5 0 0 5 (代)
F A X 03 (3268) 2 0 1 0