

文章编号: 1001-1455(2008)01-0038-06

PBX-9404 的化学反应速率方程及起爆特性^{*}

梁增友¹, 黄风雷², 张震宇³

(1. 中北大学机电工程学院, 山西 太原 030051;

2. 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081;

3. 国防科技大学理学院, 湖南 长沙 410073)

摘要: 通过对炸药化学反应速率方程的分析, 建立了基于 Kim 弹粘塑性球壳塌缩热点模型原理的三项式化学反应速率方程模型。运用遗传算法确定了反应速率方程相关参数, 通过与 Forest-Fire 反应速率模型数值模拟结果的对比对所建模型的合理性进行了验证。将所建反应速率方程模型嵌入有限元程序对 PBX-9404 炸药起爆过程进行数值模拟, 根据模拟结果分析了炸药遭受冲击加载后炸药孔隙率、颗粒尺寸等变化对炸药冲击起爆过程的影响。

关键词: 爆炸力学; 反应速率方程; 数值模拟; PBX-9404; 冲击起爆

中图分类号: O381

国标学科代码: 130 · 3510

文献标志码: A

1 引 言

炸药是弹药战斗部毁伤目标的基本能源, 也是国民经济建设中重要的高功率能源之一。随着炸药应用范围日益扩展, 炸药装药在各种条件下的安全问题已成为重要的研究课题。炸药在生产、加工、运输、储存和使用等过程中会遭受各种载荷的作用, 并产生各种微空洞、微裂纹等微损伤。损伤炸药比相同组分的未损炸药更敏感, 且很多弹药早炸、误炸事故在本质上都可以与损伤炸药在冲击载荷作用下的起爆问题联系起来。研究炸药损伤对冲击起爆特性的影响有助于认识冲击起爆的本质, 对大口径火炮发射的安全性、钻地战斗部在侵彻过程中冲击波作用安全性, 以及导弹遭受破片冲击、弹药战斗部遭受流弹等撞击是否被引爆以及炸药的燃烧转爆轰等问题的解决有重要意义。

由于炸药的冲击起爆过程是集高温、高压、高速为一体的复杂物理、化学和力学过程, 单纯的理论和实验研究是不够的。利用数值模拟技术研究损伤炸药的起爆过程可以与理论和实验研究相互支撑, 同时可以获得实验无法得到的细节, 弥补理论和实验研究的不足。本文中在对起爆过程进行分析的基础上, 建立基于 Kim 原理的三项式化学反应速率方程, 对不同孔隙度、不同炸药颗粒大小的 PBX-9404 炸药的起爆机理进行数值模拟。

2 与初始孔隙率及孔隙尺寸相关的冲击起爆模型的建立

2.1 冲击起爆反应速率方程分析

炸药的起爆反应过程通常用反应速率来描述, 反应速率方程是冲击起爆过程数值模拟中数学模型的核心, 也是数值模拟的基础。目前在数值模拟中广泛应用的模型主要有:

(1) Forest-Fire^[1] 反应速率方程, 其方程形式为

$$r = \frac{1}{W} \frac{dW}{dt} = \exp(C_0 + C_1 p + C_2 p^2 + \dots + C_n p^n) \quad (1)$$

式中: r 为反应速率, W 为反应度, t 为时间, $C_0, C_1, C_2, \dots, C_n$ 为常数, p 为压力, n 为压力指数。

该模型能够较好地预估到爆轰距离和爆轰时间, 但对某些炸药低压冲击起爆过程不能很好地描述。

* 收稿日期: 2006-08-24; 修回日期: 2007-01-19

作者简介: 梁增友(1969—), 男, 博士, 副教授。

(2) 点火-燃烧二项反应速率方程^[2]。其方程形式为

$$d\lambda/dt = (1 - \lambda)(\omega_1 p^m + \omega_2 p^n) \tag{2}$$

式中： λ 为化学反应度， ω_1 、 ω_2 为常数， m 、 n 为压力指数， p 为反应压力。该方程包括点火项和燃烧项，考虑了热点点火、燃烧在起爆过程中的作用，但是没有考虑冲击波压缩度对热点形成的影响。

E. L. Lee^[3] 在点火-燃烧二项反应速率方程^[2] 的基础上提出了反应速率方程

$$d\lambda/dt = I(1 - \lambda)^x (v_0/v_1 - 1)^y + G(1 - \lambda)^x \lambda^z p^z \tag{3}$$

式中： I 、 G 为常数， λ 为化学反应度， p 为压力， t 为反应时间， v_0 、 v_1 为炸药比体积， x 、 y 、 z 为与炸药有关的常数。该反应速率方程成功地重现了平面一维持续压力脉冲冲击起爆过程的实验结果，但对模拟短脉冲冲击起爆没有得到满意的结果。

(3) 点火-燃烧-快反应三项形式的反应速率方程^[4] 的表达形式为

$$d\lambda/dt = I(1 - \lambda)^b (\rho_1/\rho_0 - 1 - a)^x + G_1(1 - \lambda)^c \lambda^d p^y + G_2(1 - \lambda)^e \lambda^g p^z \tag{4}$$

式中： I 、 G_1 、 G_2 、 a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 g 、 z 、 x 、 y 为 12 个可调系数， a 为临界压缩度， y 为压力指数， $b=c=2/3$ 表示向内的球形颗粒燃烧； I 、 x 控制点火热点的数量； G_1 、 d 控制点火后热点早期的反应增长； G_2 、 e 、 g 、 z 决定高压下的反应速率； λ 为化学反应度， p 为反应压力。

该模型可以重现持续压力脉冲作用下的反应过程，同时能够重现短脉冲试验结果，但由于该方程的系数较多，如何调整是一个值得探讨的问题。此外还有 J. N. Johnson 等^[5] 提出的热点过程型反应速率模型，即 JTF 模型。该模型中考虑了中间态变量(热点质量分数、热点反应度、热点平均温度)对起爆过程的影响。通过对几种宏观经验反应速率模型的分析可以看出，尽管这些模型可以重现一维情况下凝聚炸药的冲击起爆实验结果，但是对于热点形成过程都缺乏清晰的物理图像，同时由于方程含有许多经验常数，不能描述“相似”炸药的冲击起爆。这里“相似”的含义是指：相同材料(炸药成分和粘合剂)、不同的粒子尺寸、不同的初始孔隙度、不同的初始温度、不同的质量分布。对于受到损伤的凝聚炸药，其主要变化是固体颗粒的破碎、固体颗粒与粘结剂的脱粘，因此需要发展一种更基本的细观模型，能够预估炸药颗粒尺寸、初始密度以及初始温度对起爆行为的影响。近年来提出了许多种这样的模型，其中以微孔洞弹粘塑性塌缩为主要热点形成机制的 Kim 模型就是典型的例子^[6-7]。本文中主要根据 Kim 模型的基本原理建立非均质炸药冲击起爆热点反应的细观动力学模型。

2.2 弹粘塑性球壳塌缩热点模型

图 1(a) 表示典型的塑料粘结炸药细观构造，由于无法对图 1 所示不规则构造进行定量考虑，为了便于数学描述，又不失热点的基本特征，将图 1(a) 所示的构造简化成图 1(b) 所示的球壳元胞模型，孔隙半径为 a 、元胞外半径 b 等于典型的炸药颗粒半径。该模型的表达式为

$$\frac{d\lambda_b(x, t)}{dt} = \int_a^b \frac{4\pi r^2 \frac{d\Lambda(r, x, t)}{dt}}{4\pi(b^3 - a^3)/3} dr \tag{5}$$

式中： r 为炸药反应燃烧半径， Λ 为胞元局部反应度， λ_b 为胞元整体反应度， a 、 b 为炸药元胞内、外半径， x 为宏观的空间坐标， t 为反应时间。该模型可以描述炸药材料属性、初始颗粒粗细、初始孔隙度、初始温度以及加载压力对热点反应的影响。

2.3 颗粒表面燃烧反应模型

E. L. Lee 等^[3] 引入了二项形式来描述反应的增长，第一项是低压下的慢反应，第二项是高压下的快反应。K. Kim 等^[6] 仍采用同样的概念，只是对具体形式做了修改，同时是在热点反应完成之后再引入反应增长项。在热点形成后的早期阶段，开始的是低压下的慢反应，假设反应从球形空洞的内表面开始向外燃烧。如果忽略初始孔隙度，体积反应速率可表示为

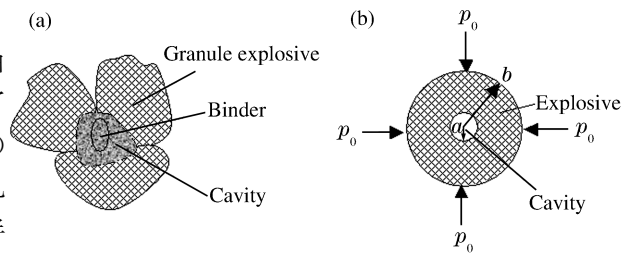


图 1 塑料粘结炸药的细观结构及炸药元胞模型

Fig. 1 Mesoscale structure of PBX-9404 and its cellular model

$$\frac{d\lambda}{dt} = -\frac{1}{v} \frac{dv}{dt} = \frac{4\pi r^2}{4\pi b^3/3} \frac{dr}{dt} = \frac{3\lambda^{2/3}}{b} \frac{dr}{dt} \quad (6)$$

式中: λ 为化学反应度, dr/dt 炸药的表面燃烧速, $dr/dt = a_1 p^{n_1}$, a_1 为系数, n_1 为压力指数, b 为炸药元胞外半径, v 为炸药元胞初始体积。

当反应继续进行, 压力进一步升高, 产物气体渗入颗粒之间的狭缝处, 反应转变成由外向内的, 也就是从单个颗粒的外表面向内燃烧, 即为快反应方式。其形式为

$$d\lambda/dt = -(1/v)dv/dt = [3(1-\lambda)^{2/3}/b]dr/dt \quad (7)$$

炸药的表面燃烧速率 dr/dt 同样由 $dr/dt = a_1 p^{n_1}$ 描述, 由于压力升高, 炸药材料被压碎, 使反应加快, 因此在式(7)中, 压力指数 n 应大于 1。但由于 Kim 模型并不能准确地描述高压部分, 因此必须对它进行修改, 在建立模型时反应增长项只取式(6)。

2.4 高压反应速率模型

张震宇等^[8]通过对定常爆轰反应区中的反应流场进行 Lagrange 分析, 给出了一种高压下的反应速率形式, 它能够很好地描述高压下爆轰反应区的结构, 其表达式为 $d\lambda/dt = Gp^z(1-\lambda)^x$, 其中 λ 为化学反应度, p 为压力, t 为反应时间, G, x, z 为与炸药有关的常数。

2.5 整体反应速率模型的建立

通过 2.2 节的讨论, 弹粘塑性球壳塌缩热点模型从细观上描述胞元点火过程, 点火完成后进入到反应增长阶段, 该阶段包括慢反应和快反应两个阶段, 但是 Kim 模型在描述高压段时并不准确, 因此在建立模型时, 慢反应阶段仍然采用 Kim 模型来描述, 在快反应阶段则采用高压反应速率模型。由此建立 PBX 炸药冲击波起爆过程的整体反应速率方程为

$$d\lambda/dt = d\lambda_h/dt + 3\lambda^{2/3}a_1p^{n_1}/b + Gp^z(1-\lambda)^x \quad (8)$$

式中: 第一项为基于 Kim 原理的细观点火模型, 第二项和第三项则分别描述了反应增长阶段。由于该模型继承了 K. Kim 的弹粘塑性球壳塌缩热点模型, 可以从细观上对起爆过程进行分析, 同时又克服了在反应增长阶段快反应描述不准确的缺点, 采用另一种形式的高压反应速率方程。因此该整体反应速率方程可以反映材料属性、加载压力、初始孔隙度以及炸药颗粒大小对炸药冲击波起爆过程的影响。模型中的未知参数 a_1, n_1, G, z, x , 采用遗传算法和一维平面冲击起爆过程中某 Lagrange 位置的应力历史曲线来确定。以遗传算法部分为主程序, 构造出拟合反应速率方程参数的计算编码, 给定参数 a_1, n_1, G, z, x 的取值范围, 构造适应度函数, 通过多次迭代就可以确定出待定参数, 本文中确定的参数值分别为 0.007 85、0.571、4.972、3.4、1.33。

2.6 整体反应速率模型准确性的验证

为了验证所建模型能否正确描述起爆过程, 用 Forest-Fire 反应速率模型和所建立的整体反应速率模型分别对 1 cm 厚铝飞片以 630 m/s 撞击 PBX-9404 炸药的冲击起爆过程进行了模拟, 模拟结果见图 2。由图 2 可看出由整体反应速率方程拟合出的曲线与原来的曲线在波形增长方式、到爆轰距离以及达

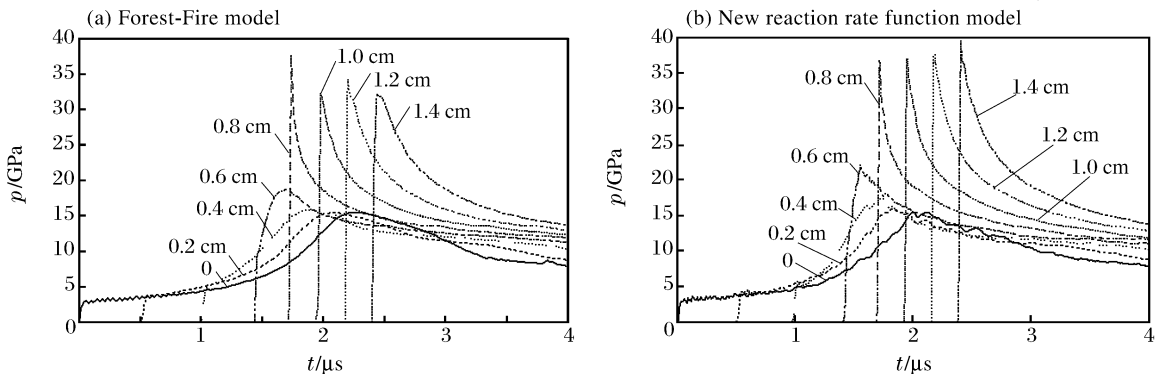


图 2 不同拉格朗日位置处两种模型计算结果比较

Fig. 2 Comparison of simulated results between the two different models at the different Lagrangian positions

到稳定爆轰后的状态都符合较好,这说明所建立的整体反应速率方程能够准确描述冲击起爆过程。

3 计算模型的建立

利用 2.5 节建立的炸药冲击起爆过程的整体三项反应速率方程(8),对铝飞片撞击下 PBX-9404 炸药初始孔隙率以及炸药颗粒粗细等初始物理不均匀参数对冲击起爆过程的影响进行数值模拟。建立模型时铝飞片材料的本构模型取流体弹塑性模型。PBX-9404 炸药和其产物状态方程取 JWL 状态方程

$$p_s = A_s \exp(-R_1 \bar{v}_s) + B_s \exp(-R_2 \bar{v}_s) + c_{v,s} W_s T / \bar{v}_s \tag{9}$$

$$p_g = A_g \exp(-r_1 \bar{v}_g) + B_g \exp(-r_2 \bar{v}_g) + c_{v,g} W_g T / \bar{v}_g \tag{10}$$

式中:下标 s 和 g 分别代表反应物和产物, \bar{v} 和 T 是相对体积和温度。其中 PBX-9404 炸药 JWL 状态方程参数分别为^[9]: $\rho_0 = 1.84 \text{ g/cm}^3, W_s = 0.8867, A_s = 952.20 \text{ TPa}, B_s = -5.944 \text{ GPa}, R_1 = 14.1, R_2 = 1.41, c_{v,s} = 2.78 \text{ J/(g} \cdot \text{K)}$;产物 JWL 状态方程参数分别为^[9]: $Q = 10.4 \text{ GJ/m}^3, W_g = 0.38, A_g = 852.4 \text{ GPa}, B_g = 18.02 \text{ GPa}, r_1 = 4.6, r_2 = 1.3, c_{v,g} = 1.0 \text{ J/(g} \cdot \text{K)}$ 。

4 孔隙率等初始物理不均匀参数对冲击起爆过程的影响

4.1 孔隙率的影响

为了比较孔隙率大小对冲击起爆过程的影响,对两种不同初始孔隙率的 PBX 炸药进行了计算,计算结果如图 3~4 所示。其中图 3 给出的是球壳元胞初始孔隙内半径 a 不同、胞元外半径 b 相同、初始孔隙率 α 不同的炸药样品,在冲击波作用下,起爆过程中不同拉格朗日位置处的压力历史剖面和质点速度历史剖面;图 4 是两种孔隙率不同的炸药的起爆冲击波阵面压力剖面增长比较。由图可以看出:在相同冲击压力作用下,初始密度小、孔隙率大的炸药样品的到爆轰距离短,冲击起爆感度较大。

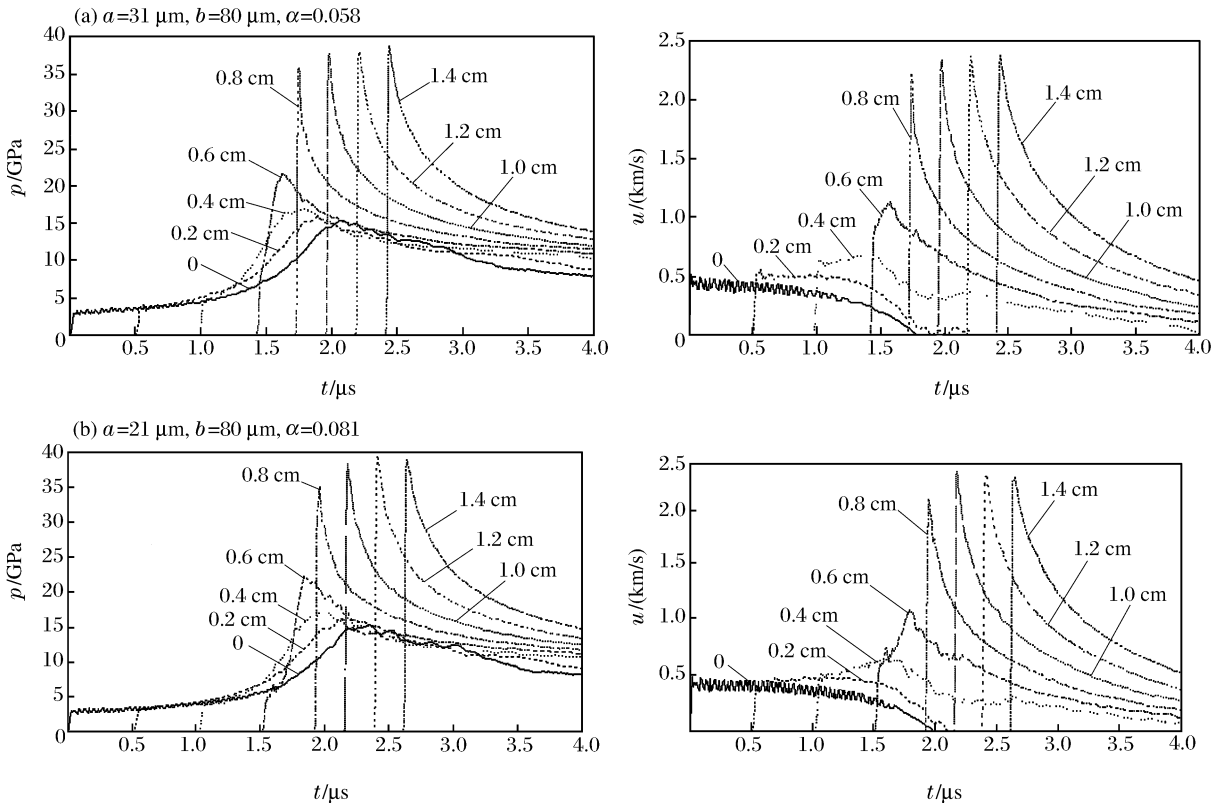


图 3 两种 PBX-9404 炸药起爆过程中不同 Lagrange 位置处的压力历史剖面和质点速度历史剖面

Fig. 3 Pressure and particle velocity histories of the two different PBX-9404 explosives with different initial characters at different Lagrangian positions during shock initiation

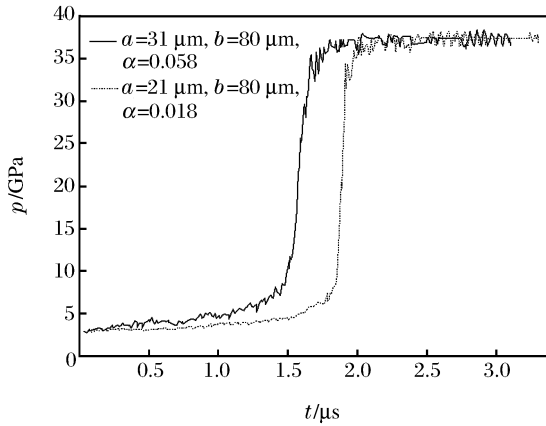


图4 两种 PBX-9404 炸药起爆冲击波阵面压力的增长
Fig. 4 Shock wave pressure growth curves of the two different PBX-9404 explosives with different initial porosities

4.2 颗粒尺寸的影响

三项反应速率模型中的第二项(增长项)描述的是颗粒表面燃烧现象,它包含了两个过程:(1)热点形成后,从孔隙内向外燃烧过程;(2)孔隙内的燃烧产物渗入颗粒间隙后由外向内的颗粒燃烧过程。模型中球壳胞元外半径 b 就等于典型的炸药颗粒半径。因此,可以通过改变球壳胞元的外半径来讨论颗粒尺寸对起爆过程的影响。

图5(a)给出了与图3(a)炸药样品有相同孔隙率、不同球壳胞元的外半径(不同颗粒半径)的计算结果,其中球壳胞元初始孔隙内半径 $a=21\ \mu\text{m}$ 、胞元外半径 $b=54.3\ \mu\text{m}$ 、初始孔隙率 $\alpha=0.058$ 。图5(b)是两种有相同孔隙率、不同颗粒半径炸药的起爆冲击波阵面压力剖面增长比较。计算结果表明,当颗粒半径减小,颗粒表面燃烧速度增加,在相同孔隙率条件下的到爆轰距离减小,因此冲击起爆感度增加。

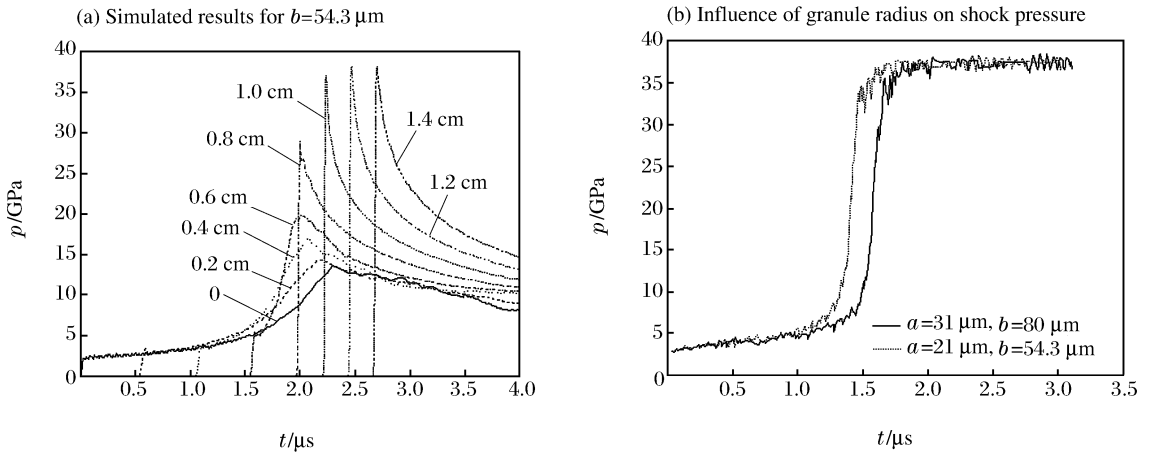


图5 颗粒尺寸对冲击起爆过程的影响

Fig. 5 Influence of explosive granule size on shock initiation process

5 结论

通过对炸药反应速率方程的分析,建立了以 Kim 弹粘塑性球壳塌缩热点模型为基础的三项式化学反应速率方程,并利用遗传算法确定了所建立的化学反应速率方程模型的相关参数。通过与现有模型数值模拟结果的对比较验证了模型的可靠性。结合数值模拟结果研究了损伤对炸药起爆性能的影响。

参考文献:

- [1] Mader C L. Numerical Modeling of Detonations[M]. Berkeley: University of California Press, 1979.
- [2] 孙承纬,卫玉章,周之奎.应用爆炸物理[M].北京:国防工业出版社,2000.
- [3] Lee E L, Tarver C M. Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives[J]. Physics of Fluids, 1980,23:2362-2372.
- [4] Tarver C M, Hallquist J O, Erickson L M. Modeling short pulse duration shock initiation of solid explosives[C]//

Proceedings of the 8th International Symposium on Detonation. Albuquerque, NM, 1985:951-961.

- [5] Tang P K, Johnson J N, Forest C A. Modeling heterogeneous high explosive burn with an explicit hot-spot process [C]//Proceedings of the 8th International Symposium on Detonation. Albuquerque, NM, 1985:4323-4334.
- [6] Kim K, Sohn C H. Modeling of reaction build-up processes in shocked porous explosives[C]//Proceedings of the 8th International Symposium on Detonation. Albuquerque, NM, 1985:926-931.
- [7] Kim K. Development of a model of reaction rates in shocked composite explosives[C]//Proceedings of the 9th International Symposium on Detonation. Portland, OR, 1989:593-693.
- [8] 张震宇, 浣石, 卢芳云, 等. 高能炸药爆轰波反应流场的拉格朗日分析方法[J]. 爆炸与冲击, 1996, 16(3):271-277.
ZHANG Zhen-yu, HUAN Shi, LU Fang-yun, et al. Lagrangian analysis of flow field in detonation reaction zone of high explosives[J]. Explosion and Shock Waves, 1996, 16(3):271-277.
- [9] 柯加山. 低冲击条件下凝聚炸药延迟起爆现象的研究[D]. 北京:北京理工大学, 2002.

Study on new reaction rate function model of PBX-9404 for damaged explosive initiation behaviour

LIANG Zeng-you^{1*}, HUANG Feng-lei², ZHANG Zhen-yu³

(1. College of Electromechanical Engineering, North University of China,
Taiyuan 030051, Shanxi, China;

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

3. National University of Defense Technology, Changsha 410073, Hunan, China)

Abstract: A new reaction rate function model was developed to represent explosive initiation process based on Kim elastic-plastic pore collapse hot spot reaction model by analyzing explosive reaction rate function models. Parameters of the developed reaction rate function model were determined by using genetic algorithms as well as one dimensional Lagrangian shock to detonation pressure curve. The new model was validated by comparison of simulation results between the new model and the Forest-Fire reaction rate function model. PBX-9404 shock initiation and detonation process was numerically simulated by embedding the new reaction rate function model into finite element analysis program. Influences of porosity and grain size change on initiation and detonation behaviours of explosive were analyzed by the numerical simulation results in the event that explosive was loaded by applied shock.

Key words: mechanics of explosion; reaction rate function; numerical simulation; PBX-9404; shock initiation

* Corresponding author: LIANG Zeng-you
E-mail address: liangnuc@tom.com
Telephone: 86-351-3923617