

文章编号: 1001-1455(2006)02-0174-05

钝感炸药的超压爆轰与冲击起爆过程数值模拟*

潘 昊, 胡晓棉

(北京应用物理与计算数学研究所计算物理国家重点实验室, 北京 100088)

摘要: 采用 Hybrid 反应率结合修正的 JWL 方程, 研究了 LX-17、超细 TATB 等钝感炸药的冲击起爆 (SDT) 过程, 并计算了爆轰波的对碰现象。结果表明, 该方法计算钝感炸药的冲击起爆过程与实验数据符合较好; 计算爆轰波对碰区的峰值压力提高了 10%。

关键词: 爆炸力学; 超压爆轰; 冲击起爆; 钝感炸药

中图分类号: O381

国标学科代码: 130 · 3520

文献标志码: A

1 引言

钝感炸药与敏感炸药相比化学反应区较宽, 反应过程更复杂, 对于冲击起爆过程, 采用不考虑化学反应的 CJ 理论计算与实验相差较远。钝感炸药冲击起爆一般采用 Forest Fire 模型^[1] 和 Ignition and Growth 模型^[2]。炸药产物状态方程是正确描述炸药的作功能力及相互作用过程的基础。标准 JWL 产物状态方程的参数是用 CJ 条件和圆筒实验结果确定的, 它的适用范围为 CJ 压至 0.1 GPa 之间, 而对于超压状态的描述是外推的。炸药产物状态方程的适用性对冲击起爆过程的计算有重要影响。

为了使模拟计算中起爆能量阈值更合理, 本文中采用 Hybrid 模型^[3], 结合修正的 JWL 形式产物状态方程^[4], 模拟钝感炸药冲击起爆过程和爆轰波的对碰过程。

2 Hybrid 反应率及冲击起爆计算结果

钝感炸药起爆过程一般需要考虑炸药化学反应过程的影响。Hybrid 化学反应模型是在 JTF 模型^[5] 的基础上发展起来的。JTF 模型根据凝聚炸药反应机理, 将反应分为热点形成、能量传递和慢反应过程。Hybrid 模型是在 JTF 模型基础上进一步考虑了化学反应中的激化过程及均质反应, 具体表达形式如下

$$\frac{d\lambda_h}{dt} = \frac{1}{\tau_h}(1 - \lambda_h) \quad (1)$$

$$\frac{dE_b}{dt} = (1 - E_b) \left[\frac{\eta(\lambda_h - f_0/\eta)}{\tau_e(1 - f_0/\eta)} + \frac{1}{\tau_H} \right] \quad (2)$$

$$\frac{d\lambda_b}{dt} = \frac{1}{\tau_x}(E_b - \lambda_b) + \frac{1}{\tau_H}(1 - E_b) \left(1 - \frac{\tau_A^+}{\tau_x} \right) \quad (3)$$

$$\frac{d\lambda_s}{dt} = \frac{1}{\tau_s}(\lambda_b - \lambda_s) \quad (4)$$

$$\lambda = \eta\lambda_h + \phi\lambda_s + (1 - \eta - \phi)\lambda_b \quad (5)$$

式中: λ 为爆炸产物的质量分数, η 为热点的质量分数, ϕ 为慢反应的质量分数。下标 h、b、s 分别表示热点、炸药反应主支及慢反应。 E_b 为炸药主支部分的中间状态。特征时间 τ_h 、 τ_e 、 τ_x 、 τ_{dx} 、 τ_A^+ 、 τ_s 分别表示热点、能量传递、激发、激发逆过程、均质反应、慢反应特征时间, τ_H 为均质反应特征时间, 其表达式为 $\tau_H = \tau_x(1 + \tau_A^+/\tau_{dx})$ ^[3,5~6]。 f_0 是热点反应的阈值。

* 收稿日期: 2005-02-22; 修回日期: 2006-01-23

作者简介: 潘 昊(1979—), 男, 硕士。

计算过程中发现,虽然 Hybrid 反应率的参数较多,但是其中部分参数与实验结果关系密切,其中反应率线性增长系数 G_0 和参考温度 θ_0 越高则炸药越敏感^[7]。并且在稳定爆轰状态下,由于此时压力较高,热点反应和能量传递过程迅速完成,故(1~3)式可以近似为

$$\frac{d\lambda_b}{dt} = \frac{1}{\tau_x} (1 - \lambda_b) \quad (6)$$

慢反应方程(4)形式不变,从而总反应率(5)式变为

$$\lambda = \eta + \phi \lambda_s + (1 - \eta - \phi) \lambda_b \quad (7)$$

从(4)、(6)、(7)式可以看出,在高压下,对计算结果影响较大的参数是激化特征时间 τ_x 和慢反应质量分数 ϕ 。计算结果表明,慢反应质量分数 ϕ 越小,则炸药与 LiF 间界面速率下降越快。而 τ_x 控制着炸药大部分能量的释放速率, τ_x 越大,则能量释放越慢,故炸药从反应开始到能量释放完毕的时间也越长。能量阈值即化学反应活化能的降低能够提高反应速率,可以使计算结果同实验值符合更好。表 1 为 PBX9502、LX-17 和亚微米 TATB 三种炸药的 Hybrid 模型部分参数, ρ_0 为初始密度, T^* 为活化温度, $T^* = \Delta E/R$, 其中 ΔE 为化学反应活化能,初始活化温度均为 30 143 K。

表 1 炸药的 HYBRID 模型基本参数

Table 1 Essential parameters of Hybrid model for high explosives

炸药	$\rho_0 / (\text{g}/\text{cm}^3)$	τ_x / ns	τ_s / ns	ϕ	G_0	θ_0 / K	η	T^* / K
PBX9502	1.895	5.0	75	0.15	43.2	813	0.004	25 119
LX-17	1.90	5.0	75	0.15	43.2	813	0.01	27 400
亚微米 TATB	1.70	2.5	75	0.10	250	760	0.01	24 114

由于 Hybrid 反应率中考虑了炸药冲击起爆过程的激化过程和均质反应过程,使超压起爆下的反应率模型更合理,可以较准确地计算 PBX9502 炸药驱动飞片和 LiF 过程^[8~9]。

3 修正的 JWL 形式产物状态方程及球面爆轰波对碰现象的计算

除了化学反应过程,对炸药起爆过程的描述,炸药产物状态方程的合理性也有重要影响。标准 JWL 形式产物状态方程,在炸药作功能力方面均与实验符合较好。但在描述超压状态的动力学行为时,标准的 JWL 形式产物状态方程需要修正。

修正的 JWL 产物状态方程形式如下^[4]

$$\begin{aligned} p_i &= [1 + F_p(\nu)] A e^{-R_1 \nu} + B e^{-R_2 \nu} + C \nu^{-(1+\omega)} \\ E_i &= [1 + F_\epsilon(\nu)] \frac{A}{R_1} e^{-R_1 \nu} + \frac{B}{R_2} e^{-R_2 \nu} + \frac{C}{\omega} \nu^{-(1+\omega)} \end{aligned} \quad (8)$$

式中: A 、 B 、 C 、 R_1 、 R_2 和 ω 均为常数, $\nu = V/V_0$ 。 $F_p(\nu)$ 、 $F_\epsilon(\nu)$ 为 ν 的函数。修正的 JWL 形式产物状态方程提高了超压下的等熵指数,符合实验结果^[4]。文献[4]中认为这主要是由于钝感炸药的慢反应过程中,炸药中的碳发生相变,以无定形碳、金刚石和石墨的形式存在下来,从而两贡献曲线上出现分离点,故超压爆轰的等熵指数 γ 在 CJ 点处突然跃升。

在球面对碰条件下,由于爆轰波的相互作用,在相互作用区出现了超压状态。标准的 JWL 形式产物状态方程,对于对碰区的压力计算值偏低。采用二维拉格朗日程序计算 PBX9502 炸药的球面对碰^[10]情况,计算结果见表 2 和表 3。

从表 2 可以看出,采用修正的 JWL 方程得到的压力峰值最大,而采用 HOM 方程得到的压力峰值较小。分别采用修正的 JWL 方程和标准的 JWL 方程计算球面爆轰波对碰,对碰点处的压力历史曲线见图 1。修正的 JWL 方程压力峰值比标准的 JWL 方程提高约 10%。

表 3 数据表明,对于 $\rho < \rho_{CJ}$ 时,用修正的 JWL 产物状态方程计算的压力 p_m 与用标准 JWL 状态方程计算结果 p_s 很接近,而 $\rho > \rho_{CJ}$ 时,用修正的 JWL 状态方程计算的压力值 p_m 高出用标准 JWL 产物状态方程的计算结果 p_s 约 7%。

表 2 采用不同产物状态方程计算的峰值压力及密度

状态方程	压力峰值处密度 /(g/cm ³)	压力峰值 /GPa
修正的 JWL 方程	3.257	63.43
标准的 JWL 方程	3.344	57.07
HOM 方程 ^[10]	3.125	50

表 3 不同密度对应的的压力计算值($\rho_{\text{Cl}}=2.557 \text{ g/cm}^3$)

ρ /(g/cm ³)	p_m /GPa	p_s /GPa	$(p_m - p_s)/p_s$
3.0	46.97	44.03	0.067
2.0	13.18	13.24	-0.0045

同样,用 Hybrid 反应率结合修正的 JWL 形式产物状态方程计算了 PBX9502 冲击起爆过程,计算结果与实验结果符合程度与采用标准的 JWL 形式产物状态方程的情况相近,但采用修正的 JWL 形式产物状态方程,超压情况下的密度值略低于标准的 JWL 形式产物状态方程的计算结果。

计算结果表明,修正后的 JWL 形式产物状态方程提高了超压情况下的压力和等熵指数 γ ,因而对爆轰波相互作用下的超压状态描述更合理。

4 LX-17 和 TATB 冲击起爆过程的计算

钝感炸药起爆一般采用高压短脉冲起爆方式^[11]。文献[11]中认为 LX-16 炸药驱动飞片以一定的速度撞击被测炸药,产生了脉冲较短、压力较高的入射冲击波,进而点燃被测药。通过激光干涉技术测量 LiF 与被测药的界面速度,从而了解被测炸药的爆轰波结构。

文献[11]中采用 Cale 冲击动力学软件计算了炸药的冲击起爆情况,对于敏感炸药,计算结果与实验结果误差较小。而关于钝感炸药 LX-17 的计算结果与实验结果还有一定距离。分别采用 CJ volume^[12]、Ignition and Growth、JTF 模型和 Hybrid 反应率与修正的 JWL 形式产物状态方程,模拟了 LX-17 和亚微米 TATB^[13] 冲击起爆过程,计算模型所用参数见表 4,计算结果见图 2 和图 3。

从图 2 和图 3 可以看出,由于 JTF 模型与 Ignition and Growth 模型中都没有考虑均质反应和激化过程,故得到的计算结果接近,界面速度峰值与实验值相比均偏低,而 Hybrid 模型可以有效地提高 von Neumann 尖点的值,与实验结果更接近。这一方面是由于修正的 JWL 形式产物状态方程对于超压情况描述更加合理,另一方面,Hybrid 反应率加入了激发过程和均质反应过程,降低了炸药起爆时的能量阈值,提高了炸药起爆时的反应速率,与实验符合更好。计算结果与实验结果相比,约在 0.1 μs 时刻计算结果偏大,这可能是因为一维模型计算中没有考虑二维稀疏效应的影响。

虽然 Hybrid 反应率结合修正的 JWL 产物状态方程能够较准确地模拟实验结果,但是由于需要捕捉冲击波强度,故计算时网格剖分很密,一般为每厘米 500 个网格,因此计算量和计算时间较大,不利于在工程问题中应用。另外,凝聚炸药起爆是个复杂的过程,Hybrid 反应率尚不能计算温度和装药密度对起爆过程的影响。

表 4 短脉冲起爆模型参数

Table 4 The parameters of short-pulse shock initiation model

被测炸药	飞片材料	飞片厚度 /cm	飞片撞击速度 /(cm/ μs)	装药长度 /cm
LX-17	Al	0.0127	0.44	0.5
亚微米 TATB	Gu	0.0120	0.23	0.3

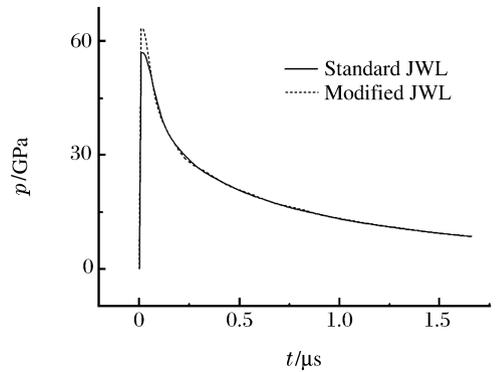


图 1 炸药对碰点处的压力历史曲线图

Fig. 1 Pressure-history curves on the colliding points of high explosive

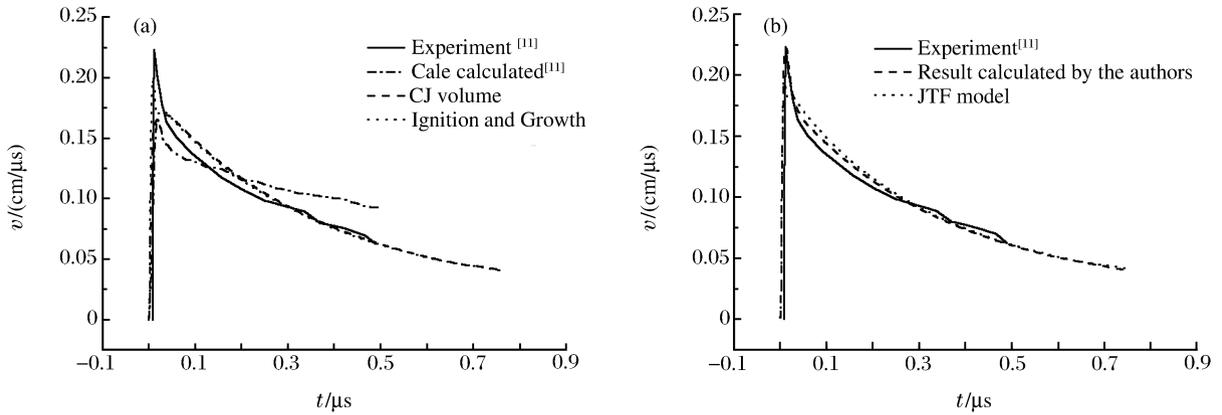


图 2 LX-17 冲击起爆 LiF 窗口速度计算与实验结果

Fig. 2 The calculated and experimental velocities of LiF window in LX-17 SDT

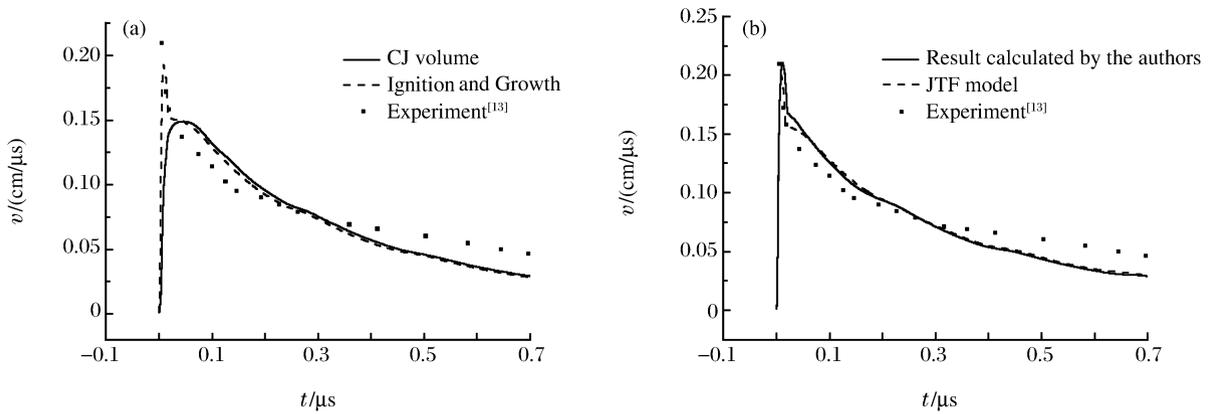


图 3 亚微米 TATB 冲击起爆 LiF 窗口速度计算与实验结果

Fig. 3 The calculated and experimental velocities of LiF window in submicron TATB SDT

5 结 论

CJ volume 模型由于并未考虑化学反应率的作用,故不存在 von Neumann 尖点,所以得到的界面速度峰值与实验相差较大。相比没有考虑激发过程和均质反应的 JTF 模型和 Ignition and Growth 模型,Hybrid 反应率降低了炸药起爆时能量阈值,能够较准确地描述炸药的反应过程,从而与炸药冲击起爆的实验结果符合较好。Hybrid 反应率结合修正的 JWJ 产物状态方程,计算 LX-17 和亚微米 TATB 等钝感炸药冲击起爆过程,计算结果与实验结果符合较好。

标准的 JWJ 形式产物状态方程,对于球面爆轰波对碰区的压力计算结果偏低。修正的 JWJ 形式产物状态方程对爆轰波相互作用下超压状态描述更合理,压力峰值略高,约 10%。同样对于冲击起爆过程,采用修正后的 JWJ 形式产物状态方程计算,与实验结果符合较好。

感谢中国工程物理研究院化工材料研究所的何碧博士为本工作提供的冲击起爆实验数据及相关参数。

参考文献:

[1] Forest C A. Burning and detonation[R]. LA-7245, 1978.
 [2] Lee E L, Tarver C M. Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives[J]. Physics of Fluids, 1980,23(12):2362-2372.
 [3] Tang P K. A study of the role of homogeneous process in heterogeneous high explosives[R]. LA-UR-93-1557,

1993.

- [4] Tang P K, Anderson W W, Fritz J N, et al. A study of the overdriven behaviors of PBX 9501 and PBX 9502[A]. 11th Symposium (International) Detonation[C]. Colorado, USA: Office of the Naval Research, 1998:1 058—1 064.
- [5] Johnson J N, Tang P K, Forest C A. Shock-wave initiation of heterogeneous reactive solids[J]. Journal of Applied Physics, 1985,57(9):4 323—4 334.
- [6] Tang P K. Initiation and detonation of heterogeneous high explosives; A unified model[R]. LA-11352-MS, 1988.
- [7] Dervaux M, Lecume S, Mala J. Reactive Behavior of case PBX's including different inert binders[A]. 11th Symposium (International) Detonation[C]. Colorado, USA: Office of the Naval Research, 1998:707—713.
- [8] Seitz W L, Stacy H L, Engelke R, et al. Detonation reaction-zone structure of PBX 9502[A]. 9th Symposium (International) Detonation[C]. Oregon, USA: Office of the Chief of the Naval Research, 1989:657—669.
- [9] Tang P K. A study of the impact of reaction rates on equation of state[R]. LA-UR-91-1789, 1991.
- [10] Mader C L, Zumbro J D, Ferm E N. Proton radiographic and numerical modeling of colliding diverging PBX-9502 detonations[A]. 12th Symposium (International) Detonation[C]. California, USA: Office of the Chief of the Naval Research, 2002.
- [11] Cutting J L, Chau H H, Hodgkin R L, et al. A small-scale screening test for HE performance: Application to the new explosive LLM-105[A]. 11th Symposium (International) Detonation[C]. Colorado, USA: Office of the Naval Research, 1998:828—835.
- [12] Mader C L. Numerical Modeling of Detonation[M]. Berkely, California: University of California Press, 1979.
- [13] 何碧. 冲击片雷管飞片速度测试及亚微米 TATB 短脉冲起爆特性研究[D]. 北京:北京理工大学, 2004.

Numerical simulation for overdriven and shocking-to-detonation transition of insensitive high explosives

PAN Hao, HU Xiao-mian*

(National Key Laboratory of Computational Physics,
Institute of Applied Physics and Computational Mathematics,
Beijing 100088, China)

Abstract: The shocking-to-detonation transition (SDT) of insensitive high explosives (IHE) including LX-17 and ultrafine TATB was studied by using Hybrid reaction rate model and modified JWL equation of state (EOS), and phenomena of colliding diverging detonation was numerically simulated. The calculated shocking-to-detonation transition (SDT) of insensitive high explosives is in agreement with the experimental result, and the calculated peak pressure in colliding diverging detonation increases 10%.

Key words: mechanics of explosion; overdriven detonation; shocking-to-detonation transition; insensitive high explosive

* Corresponding author: HU Xiao-mian
E-mail address: hu_xiaomian@iapcm.ac.cn
Telephone: 010-62014411-2578