

文章编号: 1001-1455(2012)02-0121-08

# 固体非均质炸药冲击点火与起爆模型研究进展\*

宋江杰<sup>1</sup>, 张振宇<sup>2</sup>, 谭晓莉<sup>1</sup>, 林华令<sup>1</sup>, 成丽蓉<sup>1</sup>

(1. 第二炮兵装备研究院第二研究所, 北京 100085;

2. 国防科技大学理学院, 湖南 长沙 410073)

**摘要:** 综述了固体非均质炸药冲击点火与起爆模型研究的进展, 主要探讨基于经验数据模型、微观机制模型和分子动力学理论模型这 3 类模型的理论基础、存在的问题和工程应用前景, 认为基于微观机制点火与起爆模型具有物理概念清晰以及能够预测实验结果的优点和较好的工程应用前景, 提出了后续发展的建议。

**关键词:** 爆炸力学; 点火与起爆模型; 微观机制模型; 固体非均质炸药; 分子动力学模型

**中图分类号:** O383

**国标学科代码:** 1303530

**文献标志码:** A

固体非均质炸药点火与起爆是爆轰物理的基本问题, 数值模拟是研究这个问题的重要手段。随着实验和计算能力的进步, 固体非均质炸药点火与起爆数值模拟研究近年来取得了很大的发展, 高能炸药点火与起爆数值模拟研究的核心问题是点火与起爆模型<sup>[1-7]</sup>。

众多学者对固体非均质炸药冲击点火与起爆模型进行了大量的研究。在实验观测和合理假设的基础上, 发展了基于经验数据的模型<sup>[1-4]</sup>、基于微观机制的细观模型<sup>[5-7]</sup>, 和基于分子动力学理论的模型<sup>[8]</sup>。

一个好的固体炸药冲击点火与起爆模型应该具有清晰的物理概念并能够预测实验结果, 且模型足够简洁、能够匹配现实的计算能力等基本特点。本文中, 就这些方面综述近 30 年来发展的固体非均质炸药受冲击波能量冲击引起的点火与起爆模型情况。

## 1 固体非均质炸药点火与起爆机理

固体非均质炸药点火与起爆过程可分为起始点火阶段、热点向周围点火燃烧阶段、快速燃烧转变为爆轰等 3 个阶段<sup>[9]</sup>。

### 1.1 起始点火阶段

对于固体非均质炸药起始点火机制, F. D. Bowden 等提出了“热点”学说。该学说认为外界传入的能量转变为热量, 这些热量集中在一些小点(半径为约  $10^{-1} \sim 10^1 \mu\text{m}$ )上, 炸药首先在这些小点周围发生反应, 然后扩散到整体炸药。对于机械起爆和冲击波起爆而言, 产生热点的主要原因有: (1) 炸药颗粒与其他物质的摩擦, 包括炸药颗粒与惰性杂质、炸药颗粒晶体之间以及炸药颗粒与容器壁内表面的摩擦; (2) 炸药中散布的空穴的粘塑性塌陷; (3) 当炸药从 2 个冲击面间挤出时, 炸药快速的粘塑性流动所形成的塑性加热; (4) 炸药空穴在冲击波作用下引起的界面喷射。M. M. Chaudhri<sup>[10]</sup>回顾了以前分离效应的实验, 认为摩擦和粘塑性塌陷是炸药起始反应的主要机制, 粘塑性流动仅在极端压力条件下可能对炸药反应起作用, 喷射仅在大尺寸空穴情况下有影响。J. Massoni 等<sup>[6]</sup>通过研究发现, 在冲击加载条件下, 对于压实炸药, 粘塑性空穴塌陷机制比摩擦可以产生更多的能量。综上所述, 对于冲击起爆, 粘塑性空穴塌陷是炸药起始反应的主要能量来源。

### 1.2 热点向周围点火燃烧阶段

热点起始反应后, 接下来为热点向周围点火燃烧阶段, 这是一个快速燃烧过程。在这一阶段测得的燃烧速度为亚音速的, 例如 PETN 的燃烧速度为约 460 m/s, RDX 的燃烧速度为约 300 m/s。

\* 收稿日期: 2010-09-01; 修回日期: 2011-01-14

作者简介: 宋江杰(1976—), 男, 博士, 副研究员。

### 1.3 快速燃烧转变为爆轰

当燃速达到某个极限时,快速燃烧转变为低速爆轰。对一般炸药而言,低速爆轰的速度在 1~2 km/s 之间,该速度是超音速的。当药量足够大时,低速爆轰会发展成为正常爆轰。

## 2 基于经验数据的点火与起爆模型

### 2.1 典型基于经验数据的点火与起爆模型

#### 2.1.1 经典的经验点火与起爆模型

经典的经验点火与起爆模型有 Forest-fire 模型<sup>[1]</sup>、点火与增长模型<sup>[2]</sup>、JTF 模型<sup>[3]</sup>。这类模型的代表是点火与增长模型,它使用热点成核-生长-汇合 3 个阶段来表示炸药点火与增长过程,反应速率表示为如下 3 项形式,依次表示点火、燃烧和快反应

$$\frac{d\lambda}{dt} = I(1-\lambda)^b \left( \frac{\rho}{\rho_0} - 1 - a \right)^x + G_1(1-\lambda)^c \lambda^d p^y + G_2(1-\lambda)^f \lambda^h p^z \quad (1)$$

式中: $\lambda$  为反应度, $\rho$ 、 $\rho_0$  分别表示炸药的当前密度和初始密度, $p$  表示压力, $I$ 、 $G_1$ 、 $G_2$ 、 $a$ 、 $b$ 、 $c$ 、 $d$ 、 $f$ 、 $h$ 、 $x$ 、 $y$  和  $z$  是 12 个可调系数,3 项中的每一项在合适的  $\lambda$  值时开始或截断。当  $\lambda > \lambda_{ig,max}$  时,点火项取为零;当  $\lambda > \lambda_{G1,max}$  时,燃烧项取为零;当  $\lambda < \lambda_{G2,min}$  时,快反应项取为零。

#### 2.1.2 CREST 点火与起爆模型

近年来,由于埋入式粒子速度计技术的广泛采用,取得了大量的关于炸药冲击起爆过程的实验测量数据,这些数据为评估原有模型和发展新的模型奠定了基础。前述的几种点火与起爆模型不能采用一套参数描述连续冲击起爆、多次冲击起爆和短脉冲冲击起爆现象,还需要额外的修正模型<sup>[11]</sup>。

最近的研究发现冲击起爆的反应速率仅依赖于局部的冲击波强度,并且建议使用未反应炸药的关于熵的函数来表征反应区的冲击波强度<sup>[12-13]</sup>。基于这些分析,C. A. Handley<sup>[4]</sup> 建立了基于熵的 CREST 点火与起爆模型,其形式表示为

$$\dot{\lambda} = m_1 \dot{\lambda}_1 + m_2 \dot{\lambda}_2 \quad (2)$$

式中: $\dot{\lambda}_1 = [-2b_1 \ln(1-\lambda_1)]^{1/2} (1-\lambda_1)$ ,  $\dot{\lambda}_2 = \left[ 2b_2 \left( \frac{b_2 \lambda_1}{b_1} - \ln(1-\lambda_2) \right) \right]^{1/2} \lambda_1 (1-\lambda_2)$ ,  $b_1 = c_0 Z_s^{c_1}$ ,  $b_2 = c_2 Z_s^{c_2}$ ,  $m_1 = \frac{c_4}{\sqrt{b_1}} (1-\lambda)$ ,  $m_2 = \frac{c_5 Z_s^{-c_6} + c_7 Z_s^{c_8}}{\sqrt{b_2}} (1-\lambda)$ ,  $Z_s$  表示未反应区的熵, $\lambda_1$  为快速反应速率项, $\lambda_2$  为慢速反应速率项, $c_0 \sim c_8$  为常数,各物理量中的下标 1 均表示与快速反应相关的量,下标 2 均表示与慢速反应相关的量。

CREST 模型采用基于熵的反应速率模型,点火与增长模型等经典模型采用基于压力的反应速率模型。由于此原因,CREST 模型需要更细致的数值计算网格,并且存在界面上熵计算需要特殊处理等问题<sup>[14]</sup>。但是 CREST 模型的研究,还是给出了基于熵的反应速率模型比基于压力的反应速率模型具有更广泛应用范围的提示。

### 2.2 基于经验数据的模型评价

由于基于经验数据的点火与起爆模型简单易用,计算量小,在冲击起爆、破片撞击等领域得到了应用。特别是点火与增长模型已嵌入到 LS\_DYNA、AUTODYN 等成熟的商业软件中,并且相应炸药参数研究较多。但是,所有这些经验反应速率模型点火的概念不是建立在清晰的物理概念基础之上的,从而这些模型的参数需要针对特定的问题和边界条件专门标定,并且只有在标定点附近有效,不具有预测分析功能,应用到复杂问题存在困难。造成这些困难的原因是这些模型没有考虑炸药颗粒级的点火、反应和产物气体的生成过程。

## 3 基于微观机制的点火与起爆模型

为了研究冲击加载下固体炸药的微观点火与起爆机制,众多学者进行了半个多世纪的研究,在

C. L. Mader<sup>[15]</sup> 和 R. E. Setchell 等<sup>[16]</sup> 研究了炸药空穴塌陷模型以及 M. M. Carroll 等<sup>[17]</sup> 和 B. M. Butcher 等<sup>[18]</sup> 研究了粘塑性多孔材料的基础上, B. A. Khasainov 等<sup>[19]</sup> 提出了描述冲击起爆的粘塑性空穴塌陷模型, 该模型使用比较简单的方法, 首次考虑了空穴内气体的影响, 两相间的质量转换以及固相炸药的化学分解。R. B. Frey<sup>[20]</sup> 进一步证实在冲击起爆中, 粘塑性空穴塌陷模型是主要的点火机制。J. Kang 等<sup>[5]</sup> 集成了这些工作, 建立了一个相当精细的粘塑性空穴塌陷模型, 仔细考虑了热传导和辐射, 由于固体分解引起的质量流动以及气体炸药分解动力学、塑性和粘性功等基本现象, 建立了每个相的守恒方程和界面条件。该模型是固体含能材料点火与起爆模型的一个重要进展, 接下来的工作多以它为基础。

Kang 模型包含了表面动力学机制和详细的气相反应, 以前一些学者比较仔细地研究了个别推进剂的这些因素, 但是对于大多数固体炸药来说很难获取这些反应细节, 因此难以得到推广应用。T. Hasegawa 等<sup>[21]</sup> 改进了模型中能量方程和化学反应模型。J. Massoni 等<sup>[6]</sup> 进一步改进了 Kang 模型, 提出了一种更实用的简化模型。

大部分基于微观机制的模型仅考虑了冲击加载条件, 而没有考虑摩擦等其他因素。为了建立更普遍的热点点火与起爆模型, Y. Hamate 等<sup>[7]</sup> 建立了一个描述热点点火与起爆的框架模型。

### 3.1 基本思路

建立基于微观机制的点火与起爆模型, 需要解决模型基本假设、热点模型的数学描述、微观模型与宏观物理量的联系以及相应的计算策略等 4 个问题, 下面分别说明。

#### 3.1.1 模型基本假设

尽管有多种引起热点起始反应的原因, 但在热点反应中有共同的特征, 包括: 被相对低温固体包围的一个局部加热的区域, 空隙空间充满气体和在这些区域间存在热和物质流动, 以及化学反应仅在气固界面发生。通过分析真实固体炸药的结构, 并考虑上叙因素, 将热点模型简化为一维模型。

对于冲击波加载条件, Massoni 热点模型采用内部含有空气的球状空穴模型, 如图 1 所示。相对于空穴塌陷的时间, 冲击波经过这个固体球的时间是非常短的, 因此可以认为这个过程是瞬时完成的。这样, 空穴模型的周围可以认为被相同的冲击波压力作用。在球对称假设下, 粘塑性塌陷模型可以简化为一维问题。

为了分析冲击、剪切、摩擦等多种原因引起的热点点火现象, Y. Hamate 等<sup>[7]</sup> 发展了一种统一热点模型。固体非均质炸药可用图 2(a) 所示的统计体

积表示。建立简化模型的第 1 步是将体积等效为一个褶皱面分开的体积, 这个面附近的狭小区域代表集合热点。这个褶皱面的面积  $f_A$  为参与反应的热点区域面积的总和。建立简化模型的第 2 步是将褶皱反应面等效为一个平面热点条, 如图 2(c) 所示, 所有的热点反应过程在这个平面热点胞元上描述。理想化热点胞元统一用图 3 所示的平面表示, 其中:  $p_B$  为外部压力,  $E$  为局部沉积能量,  $\dot{m}$  固相转化为气相的质量流速,  $q$  为气相单位体积热释放量,  $\sigma_{s,a}^{zx}$  为气固界面的剪切应力。理想化热点胞元由固相、气相、气固界面组成。气固界面是热点反应的区域, 也是区域能量施加区域。除了作用在气固表面上的剪切应力, 其他物理机制都发生在  $z$  轴上(关于  $x$  轴对称), 也就是说理想化热点胞元是一维模型。

热点的反应分为界面加热、内部燃烧和外表面燃烧 3 个阶段完成。在界面加热阶段, 热点没有化学反应, 主要由外界能量输入引起加热。当气固界面温度达到炸药气化温度时, 炸药开始分解并发生内部燃烧反应。当内部燃烧发生一段时间后, 加热的气体逃离了空穴, 引起炸药颗粒的外表面燃烧。

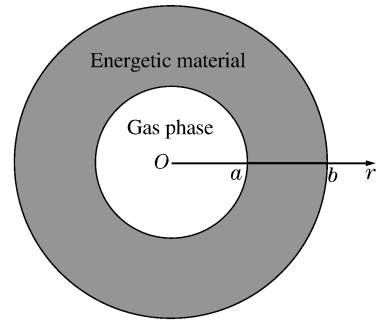


图 1 冲击加载热点模型示意图

Fig. 1 Hot spot model under shock wave compression

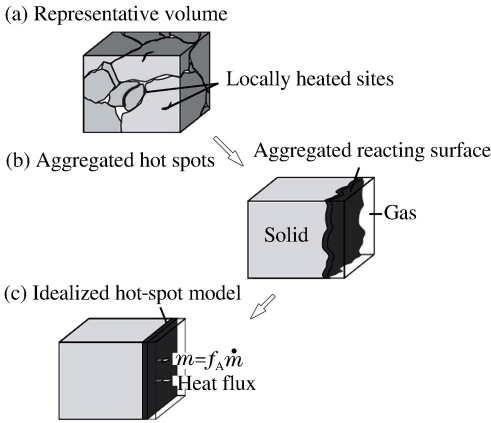


图 2 热点胞元模型简化过程图

Fig. 2 Predigesting progress of hot spot model

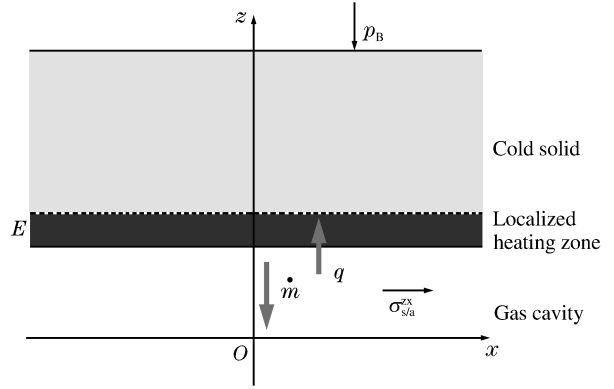


图 3 理想化热点胞元模型

Fig. 3 Idealized hot spot model

### 3.1.2 热点模型的数学描述

气固及界面基本控制方程包括气相和固相的质量、动量和能量守恒方程,气固界面的质量、动量和能量关系。这 9 个基本方程可以是微分方程、也可能是偏微分方程形式。与一般物质守恒方程不同的是,方程中增加了由于界面化学反应引起的质量流动、压力变化和能量传递等因素。

另外,为了封闭方程组,还包括气相的状态方程和固态的本构关系和物态方程、热点的统计分布特性等。求解这些方程,可以得到热点胞元的物理参数。

### 3.1.3 表面化学反应

实际的气固表面化学反应机制非常复杂,详尽描述这些反应是不现实的。一方面模型非常复杂,另一方面模型的参数也难以获取。目前,Massoni 模型和 Horie 模型采用类似的简化表面化学反应模型。

在界面温度达到相变温度前,质量流动量  $\dot{m} = 0$ 。当界面温度达到临界温度后,界面处固体升华为气体反应物,接下来气体反应物发生一步不可逆反应生成气体产物。相对于更复杂得热化学平衡计算法,该种处理方法在热化学计算程序中已经展示了它的简单和高效特性。

### 3.1.4 宏观与微观的联系

为了使微观模型加入到宏观连续力学计算,需要建立宏观力学与微观模型的联系。这种联系是双向的,包括微观气固两相状态物态方程到宏观力学的联系、宏观力学加载环境到热点边界条件的联系。

准确地描述微观气固两相状态物态方程到宏观力学的联系可以采用非平衡两相流动模型<sup>[22-24]</sup>,但是该方法过于复杂并且存在数值计算方法上的困难,因此并没有得到推广应用。另一种方法是通过微观模型状态建立宏观力学的混合物态方程。对于混合物态方程需要假定两相压力均衡。另外,还需要一个均衡假定:密度或者温度均衡。当然,混合物态方程不能提供两相流模型所提供的信息量,并且所有的这些假定都不是非常严格的,但是固体含能材料的爆轰问题的计算程序几乎都采用了这些假定。对于混合物态方程,混合密度  $\rho$ 、混合内能  $e$  可表示为

$$\rho = \varphi \rho_g^{\text{hy}} + (1 - \varphi) \rho_s^{\text{hy}} \tag{3}$$

$$\rho e = \varphi \rho_g^{\text{hy}} e_g + (1 - \varphi) \rho_s^{\text{hy}} e_s \tag{4}$$

式中:  $\varphi$  表示流体单元中气相所占比例,  $\rho_g^{\text{hy}}$ 、 $\rho_s^{\text{hy}}$  分别表示流体单元中气相和固相密度,  $e_g$ 、 $e_s$  分别表示流体单元中气相和固相的内能。

若气相和固相的物态方程表示为 Mie-Grüneisen 方程的形式,在气相和固相之间局部压力平衡假设下, J. Massoni 等<sup>[6]</sup>发现混合压力相同的 Mie-Grüneisen 物态方程形式

$$p(\rho, e) - p^*(\rho) = \Gamma(\rho) \rho (e - e^*(\rho)) \tag{5}$$

其中  $\Gamma$ 、 $p^*$  和  $e^*$  分别表示为

$$\frac{1}{\Gamma} = \frac{\varphi}{\Gamma_g} + \frac{1 - \varphi}{\Gamma_s} \tag{6}$$

$$p^* = \Gamma \left[ \frac{\varphi p_g^*(\rho_g)}{\Gamma_g} + \frac{(1 - \varphi) p_s^*(\rho_s)}{\Gamma_s} \right] \tag{7}$$

$$e^* = \frac{1}{\rho} [\varphi \rho e_g^* + (1 - \varphi) \rho_s e_s^*] \tag{8}$$

式中： $\Gamma$  为 Mie-Grüneisen 系数，其余各物理量中的上标 \* 表示参考值，下标 g、s 分别表示气相和固相。

宏观力学加载环境到热点边界条件的联系主要包括宏观力学加载环境得到的压力、剪切力以及能量沉积量等。压力、剪切力可以直接加到微观热点模型上，能量沉积量需要建立相应的模型。

### 3.1.5 计算策略

热点点火与起爆的计算可以采用图 4 所示的计算策略，在宏观连续力学计算程序中加入热点点火与起爆模型，建立细观与宏观的联系，形成细观、宏观跨尺度计算程序。

现有的动力学计算程序如有限元程序 DYNA\_2D、有限差分程序 SSS、特征线程序 CSIN 等程序都可以加入热点模型。从处理复杂边界条件看，有限元程序可以更好的实现工程应用。由于问题的跨尺度特性，计算网格需要到  $10 \mu\text{m}$  量级，造成了相当大的计算量。

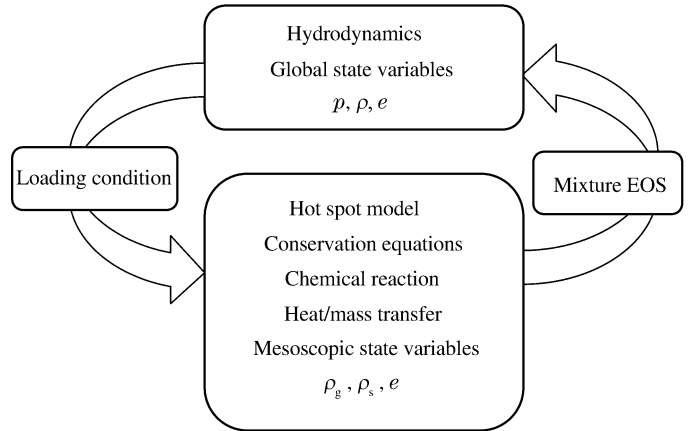


图 4 跨尺度计算策略示意图

Fig. 4 Scale-span calculation method

### 3.2 基于微观机制的点火模型评价

基于微观机制模型的物理意义明确，大部分参数基于物理意义，经验参数少。这些模型可以预测炸药的 SDT 现象，可以反映炸药材料属性、初始颗粒粗细、初始孔隙度、初始温度以及加载压力对起爆性能的影响。Horie 模型还具有处理摩擦、剪切加热起爆问题的能力。

随着大规模计算能力的发展，基于微观机制的点火模型具有了应用到工程问题的基础。通过进一步发展跨尺度计算技术，可以预见在不久的将来这些模型具有应用到复杂工程问题的可能性。

## 4 基于分子动力学理论的模型

20 世纪 80 年代后期，计算机技术的飞速发展使得应用分子动力学方法<sup>[25]</sup>对固相过程进行模拟成为可能。分子动力学方法区分的标准主要在于得到原子间的势函数<sup>[26]</sup>，得到原子间势函数有量子方法、半经验方法、经验方法等 3 个尺度的近似<sup>[27]</sup>。近年来，用分子动力学方法在研究含能材料的起爆过程和机理方面开展了许多工作<sup>[28-33]</sup>，大多采用了半经验势函数方法。

基于分子动力学理论的固体非均质炸药点火与起爆模型主要分为 2 类<sup>[34]</sup>：第 1 类考虑实际的炸药分子的三维分子结构。虽然这类模型解释了实际含能化合物的起爆和爆轰，但由于模型结构复杂、计算量大，目前主要用来研究单个或少量分子的基本化学反应中的能量传输机制。这类模型的代表为 A. Strachan 等<sup>[35]</sup>所提出的反应力场模型。第 2 类模型采用模型化的体系，例如单原子或双原子分子点阵。由于模型相对简单，因此所考虑的体系也较大，可以进行几百万个原子的模拟，模拟时间可达几十皮秒。它关注的重点是冲击或碰撞所引起的爆轰过程本身，如冲击波和化学反应波在晶体中的运动、波的结构和特性、能量模式之间的转换机制等，并且能够引入一些结构缺陷（如空穴、杂质、纳米裂纹等）研究其对于起爆过程的影响。这类研究的代表为 D. W. Brenner 等<sup>[28]</sup>所提出的反应经验键序函数模型。

### 4.1 基于 REBO 势函数的固体炸药起爆机理研究

REBO 势函数的最初形式来源于针对共价键系统的 Abell-Tersoff 表达式<sup>[36-37]</sup>，后经多次改进，特别是 D. W. Brenner 等<sup>[28]</sup>的工作，被用来描述含碳分子之间以不同能量发生碰撞的物理、化学过程。模

型描述一种双原子分子晶体,构成一个分子的原子可以有 2 种类型,若分别用  $A$ 、 $B$  来表示,则分子类型可以是  $AB$ 、 $AA$ 、 $BB$  等 3 种。势函数形式为

$$V_{\text{bond}}(r_{ij}) = V_r(r_{ij}) - \bar{B}_{ij}V_a(r_{ij}) \quad (9)$$

$$V_{\text{non-bond}}(r_{ij}) = V_{\text{vdW}}(r_{ij}) \quad (10)$$

式中: $V_{\text{bond}}$ 为分子内强相互作用, $V_{\text{non-bond}}$ 为分子间的弱相互作用, $r_{ij}$ 为系统中任意 2 个原子  $i$  和  $j$  间的距离, $V_r$ 和  $V_a$ 分别表示分子内 2 个原子的排斥和吸引作用, $V_{\text{vdW}}$ 为 Van der Waals 势, $\bar{B}_{ij}$ 代表周围的原子分布修正了这对原子的相互作用。这种形式的势函数在一个原子对经历不断增加的当地密度时(例如冲击波经过时的情况),削弱吸引作用,同时增强排斥作用。这个模型提出了一个简单而普遍的化学反应方程式为  $2AB \rightarrow A_2 + B_2 + \Delta Q$ 。

T. C. Germann 等<sup>[33]</sup>采用 REBO 势函数模型研究了含能材料中的空穴在冲击作用下的塌陷过程。体系包含 2 200 000 个原子,空穴半径为 7.7 nm,模拟结果表明点火过程并非简单的力学过程,而是一个化学过程;大的空穴(半径大于 10 nm)可明显降低起爆阈值。

#### 4.2 基于分子动力学理论的模型评价

到目前为止,凝聚态炸药起爆的分子动力学研究的主要受限于高度理想化的含能分子描述。尽管如此,采用这些模型所进行的分子动力学模拟已经比较成功地再现了凝聚态爆轰过程的许多重要特性。而且,现有的势函数模型正在不断地被改进,新的原子间相互作用的计算方法也在陆续地被提出。对于凝聚态含能材料及其受到激励后所发生的化学反应过程的描述将会越来越准确。

从计算的角度来看,已知的真实爆轰的典型反应区长度还是远超出分子动力学模拟的能力,因此在可预见的未来,爆轰过程的分子动力学模拟可能还只是保持在建立模型以及定性研究的阶段<sup>[32]</sup>。

### 5 总结与展望

自 20 世纪 80 年代以来,固体非均质炸药点火与起爆模型研究取得了长足的发展。基于经验数据的点火与起爆模型在 20 世纪 80 年代期间取得了很大的成就,近期随着实验技术的进步又有了新的发展;基于分子动力学理论的模型一直处于理论探索阶段,目前应用还不成熟;自 20 世纪 90 年代 Kang 模型<sup>[5]</sup>提出以来,基于微观机制的点火与起爆模型研究取得了很大的进展,基本理论已经趋向成熟,可以预见在不久的将来这些模型具有应用到复杂工程问题的可能性。

在不断追求钝感高能炸药、评估意外刺激情况下的安全性和深钻地战斗部装药侵彻安定性等需求的牵引下,近年来对于冲击与摩擦、剪切等联合作用下的点火与起爆模型的研究也越来越迫切,Horie 模型<sup>[7]</sup>给出了一个研究的框架,这将是固体非均质炸药点火与起爆模型下一步研究的一个重点方向。

#### 参考文献:

- [1] Forest C A. Burning and detonation; Technical report of Los Alamos Scientific Lab[R]. LA-7245, New Mexico; Los Alamos Scientific Lab, 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] Johnson J N, Tang P K, Forest C A. Shock-wave initiation of heterogeneous reactive solids[J]. Journal of Applied Physics, 1985,57(9):4323-4334.
- [4] Handley C A. The CREST reactive-burn model[C]//Proceedings of the Conference of the American Physical Society Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter. Waikoloa, Hawaii, 2007:373-376.
- [5] Kang J, Butler P B. A thermomechanical analysis of hot spot formation in condensed-phase, energetic materials combust[J]. Combustion and Flame, 1992,89(2):117-139.
- [6] Massoni J, Saurel R, Baudin G, et al. A mechanistic model for shock initiation of solid explosives[J]. Physics of Fluids, 1999,11(3):710-736.
- [7] Hamate Y, Horie Y. Ignition and detonation of solid explosives; A micromechanical burn model[J]. Shock Waves,

2006,16(2):125-147.

- [8] 谭晓莉,曾新吾,王裴. 固体炸药冲击起爆的分子动力学研究[D]. 长沙:国防科技大学,2005.
- [9] 蔡瑞娇. 火工品设计原理[M]. 北京:北京理工大学出版社,1999:36-42.
- [10] Chaudhri M M. The initiation of fast decomposition in solid explosives by fracture, plastic flow, friction and collapsing voids[C]//Proceedings of the 9th symposium detonation. Portland, Oregon, 1989:331-339.
- [11] Tarver C M, Cook T M, Urtiew P A, et al. Multiple shock initiation of LX-17[C]//Proceedings of the 10th Detonation Symposium. Massachusetts, 1993:696-703.
- [12] Lambourn B D. An interpretation of particle velocity histories during growth to detonation[C]//Proceedings of the Conference of the American Physical Society Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter. Portland, Oregon, 2003:367-370.
- [13] James H R, Lambourn B D. On the systematics of particle velocity histories in the shock to detonation transition regime[J]. Journal of Applied Physics, 2006,100(8):084906.
- [14] Nicholas J W. Some issues regarding the hydrocode implementation of the CREST reactive burn model[C]//Proceedings of the 13th Symposium Detonation. Norfolk, Virginia, 2006.
- [15] Mader C L. Numerical modeling of detonations[M]. Berkeley: University of California Press, 1979.
- [16] Setchell R E, Taylor P A. The effects of grain size on shock initiation mechanisms in hexanitrostilbene HNS explosive[C]//Dynamics of Shock Waves, Explosions and Detonations, Progress in Astronautics and Aeronautics. 1984:350-368.
- [17] Carroll M M, Holt A C. Static and dynamics pore collapse relations for ductile porous materials[J]. Journal of Applied Physics, 1972,43(4):1626-1636.
- [18] Butcher B M, Carroll M M, Holt A C. Shock wave compaction of porous aluminium[J]. Journal of Applied Physics, 1974,45(9):3864-3875.
- [19] Khasainov B A, Borisov A A, Ermolaev B S, et al. Two-phase visco-plastic model of shock initiation of detonation in high density pressed explosives[C]//Proceedings of the 7th Symposium Detonation. Annapolis, Maryland, 1981:435-447.
- [20] Frey R B. Cavity collapse in energetic materials: Technical report of army ballistic research lab aberdeen proving ground[R]. ADA172513, 1986.
- [21] Hasegawa T, Fujiwara T, Yasuhara M. Propagation velocity and mechanism of bubble detonation[C]//Dynamics of Shock Waves, Explosions and Detonations, Progress in Astronautics and Aeronautics. 1984.
- [22] Butler P B, Lambeck M F, Krier H. Modeling of shock development and transition to detonation initiated by burning in porous propellant beds[J]. Combustion and Flame, 1982,46:75-93.
- [23] Baer M R, Nunziato J W. A two phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials[J]. International Journal of Multiphase Flow, 1986,12(6):861-889.
- [24] Bdzil A K, Menikoff R, Bdzil J B, et al. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials: A critical examination of modeling issues[J]. Physics of Fluids, 2001,13(10):378-402.
- [25] Heermann D W. 理论物理学中的计算机模拟方法[M]. 秦克诚,译. 北京:北京大学出版社,1996:16-58.
- [26] 张田忠,郭万林. 纳米力学的数值模拟方法[J]. 力学进展,2002,32(2):175-188.
- ZHANG Tian-zhong, GUO Wan-lin. Recent advances of numerical simulation methods in nanomechanics[J]. Advances in Mechanics, 2002,32(2):175-188.
- [27] Manaa M R, Fried L E, Reed E J. Explosive chemistry: Simulating the chemistry of energetic materials at extreme conditions[J]. Journal of Computer-Aided Materials Design, 2003,10(2):75-97.
- [28] Brenner D W, Robertson D H, Elert M L, et al. Detonations at nanometer resolution using molecular dynamics [J]. Physical Review Letters, 1993,70(14):2174-2177.
- [29] Haskins P J, Cook M D. Molecular dynamics studies of shock initiation in a model energetic material[J]. AIP Conference Proceedings, 1993,309:1341-1344.
- [30] Rice B M, Mattson W, Grosh J, et al. Molecular-dynamics study of detonation(I): A comparison with hydrodynamic predictions[J]. Physical Review: E, 1996,53(1):611-622.

- [31] Rice B M, Mattson W, Grosh J, et al. Molecular-dynamics study of detonation( II ): The reaction mechanism[J]. *Physical Review: E*, 1996,53(1):623-635.
- [32] Germann T C. Large-scale molecular dynamics simulations of shock-induced plasticity, phase transformations, and detonation[C]// *Shock Compression of Condensed Matter-2001: 12th APS Topical Conference*. 2001:333-338.
- [33] Germann T C, Holian B L, Lomdahl P S. Molecular dynamics simulations of detonation in defective explosive crystals[C]// *Proceedings of the 12th Symposium Detonation*. San Diego, California, 2002.
- [34] Politzer P, Alper H E. Detonation initiation and sensitivity in energetic compounds: Some computational treatments[R]. N00014-99-1-0393, 1999.
- [35] Strachan A, van Duin A C T, Chakraborty D, et al. Shock waves in high-energy materials: The initial chemical events in nitramine RDX[J]. *Physical Review Letter*, 2003,91(9):098301.
- [36] Abell G C. Empirical chemical pseudopotential theory of molecular and metallic bonding[J]. *Physical Review: B*, 1985,31(10):6184-6196.
- [37] Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems[J]. *Physical Review: B*, 1988,37(12):6991-7000.

## A review of models describing shock-induced ignition and detonation of solid heterogeneous explosives\*

SONG Jiang-jie<sup>1</sup>, ZHANG Zhen-yu<sup>2</sup>, TAN Xiao-li<sup>1</sup>,  
LIN Hua-ling<sup>1</sup>, CHENG Li-rong<sup>1</sup>

- (1. *The Second Institute of the Second Artillery Equipment Academe, Beijing 100081, China;*  
2. *College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, Hunan, China*)

**Abstract:** This review aims at the main progresses of the models describing shock-induced ignition and detonation of solid heterogeneous explosives since 1980s. These models can be divided into three types: empirical models, micromechanical models and molecular dynamics based models. The corresponding theories to these models are analyzed as well as the existent difficulties in theoretical investigation and practical application, and the application possibilities of these models to complex engineering problems are explored. Investigated results show that the micromechanical models take on unambiguous concepts and can predict the experimental results, and they have good application prospects in engineering practice. At last, some advices about the micromechanical models are given.

**Key words:** mechanics of explosion; ignition and detonation; micromechanical model; solid heterogeneous explosive; molecular dynamics based model

\* Received 1 September 2010; Revised 14 January 2011

Corresponding author: SONG Jiang-jie, song\_jiang\_jie@sina.com