

文章编号: 1006-9941(2007)05-0464-04

## PBX-9404 炸药冲击起爆微观反应速率模型

田占东, 张震宇

(国防科技大学理学院技术物理研究所, 湖南长沙 410073)

**摘要:** 针对非均质炸药的冲击起爆过程, 选择以微孔洞粘塑性塌缩形成的热点为主的热点形成机制, 建立了 PBX-9404 炸药在冲击波作用下的微观化学反应动力学模型; 由于空穴塌缩而发生点火, 增长阶段是从内向外的表层燃烧和从外向内的颗粒燃烧。将得到的反应速率模型加入到一维流体动力学程序 SSS 中, 采用遗传算法, 建立非线性优化模型, 确定了 PBX-9404 炸药反应速率方程中的参数。利用 SSS 程序模拟了一维情况下 PBX-9404 的冲击起爆行为。

**关键词:** 爆炸力学; 遗传算法; 冲击起爆; 反应速率

**中图分类号:** TJ55; O381

**文献标识码:** A

### 1 引言

在大多数非均质炸药冲击起爆的化学反应速率模型中, 热点是一个共同特征, 热点的形成和成长是理解非均质炸药冲击起爆机理和行为的关键。目前比较常用的反应速率模型中<sup>[1,2]</sup>, 大多是宏观经验模型, 尽管这些模型可以重现一维情况下非均质炸药冲击起爆的实验结果, 但是对于热点形成过程, 它们都缺乏清晰的物理图像, 不能细致描述冲击起爆过程的机理。各种炸药的反应速率系数缺乏通用性, 也看不出明显的规律性, 很难考虑影响炸药感度的某些重要因素, 譬如同一配方的压装炸药, 其颗粒尺寸或孔隙度都对起爆行为有一定影响。

本文在分析研究 Kim 等<sup>[3]</sup>提出的流体弹粘塑性球壳塌缩模型的基础上, 对其进行改进, 建立了非均质炸药在冲击波作用下的微观化学反应动力学模型, 将改进的模型加入到一维流体动力学程序 SSS 中, 利用遗传算法<sup>[4]</sup>确定了反应速率方程中的参数, 模拟了 PBX-9404 炸药的冲击起爆过程。

### 2 非均质炸药微观化学反应动力学模型

Kim<sup>[3]</sup>提出了非均质炸药冲击起爆的弹粘塑性球壳塌缩模型, 把如图 1 所示的典型塑料粘结炸药的微观结构简化成如图 2 所示的球壳元胞模型。图中 A 是炸药颗粒, B 是粘结剂, C 是空穴,  $p_0$  是冲击波在炸药中产生的压力, 球壳外半径  $b$  等于典型的炸药颗粒

半径, 内半径为  $a$ 。



图1 高聚物粘结炸药微观结构  
Fig. 1 Meso-structure of PBX-9404

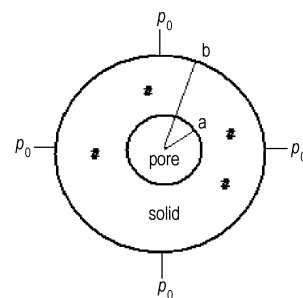


图2 球壳元胞模型  
Fig. 2 Hollow sphere model

假设炸药材料是简单的弹粘塑性体, 结合初始条件和边界条件, 从而得到炸药球壳内由于力学变形引起的温升, 考虑到热传导和化学反应放热的影响, 可以得到炸药球壳内的温度分布是:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{2.25\gamma(p_0 - p_g - 2\sqrt{3}\tau \ln(b/a))^2}{\rho\tau C_p (a^{-3} - b^{-3})^2 r^6} + \frac{1}{\rho C_p} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 k \frac{\partial T}{\partial r}) + \frac{Q}{\rho C_p} \frac{d\Lambda}{dt} \quad (1)$$

收稿日期: 2006-11-15; 修回日期: 2007-01-22

作者简介: 田占东(1978-), 男, 讲师, 从事爆炸过程的数值模拟研究。

e-mail: sweetttd@163.com

$$T = T_0(r, x, t) + \int_0^t \frac{dT}{dt}(r, x, t) dt \quad (2)$$

对热点反应使用 Arrhenius 定律, 可得到局部反应度:

$$\frac{d\Lambda}{dt} = (1 - \Lambda)Z \exp\left(-\frac{T^*}{T(r, x, t)}\right) \quad (3)$$

局部反应度  $\Lambda(r, x, t)$  在球形空洞内积分就可以得到整体反应度  $\lambda_h(x, t)$ :

$$\frac{d\lambda_h(x, t)}{dt} = \int_0^b \frac{\frac{d\Lambda}{dt}(r, x, t) 4\pi r^2}{\frac{4}{3}\pi(b^3 - a^3)} dr \quad (4)$$

式中,  $x$  是炸药内的宏观坐标,  $r$  是球壳内径向半径,  $\tau$  是剪切屈服强度,  $p_g$  是空穴中的气压,  $Z$  是 Arrhenius 反应律中的频率因子,  $T^*$  是活化温度,  $T_0$  是初始温度,  $\rho$  是密度,  $k$  是热传导系数,  $C_p$  是定压热容,  $Q$  是反应热,  $\gamma$  是与炸药材料粘性有关的常数,  $a$  和  $b$  由炸药的孔隙度以及颗粒大小确定。各参数值取自文献[3]。

图 3 给出的是 3.5 GPa 压力作用下, 热点阶段的反应度, 在热点反应的开始阶段, 反应度增长很快, 到达一定值(这里是大约 0.01)后, 热点反应变得很缓慢。这是因为, 开始阶段由于塑性力学变形, 靠近球壳内表面的地方温度迅速升高, 并且按照 Arrhenius 定律发生反应, 后来由于空穴内气体压力不断升高, 球壳变形减慢, 球壳内炸药升温速率降低, 同时由于热传导的影响, 使热点反应变慢。

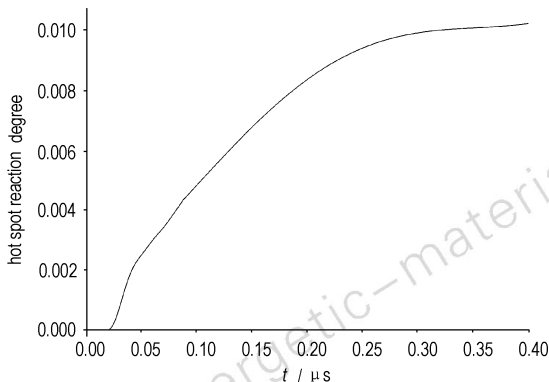


图 3 热点反应度

Fig. 3 Hot spot reaction degree

在热点形成后的早期阶段, 也就是低压下的慢反应, 假设反应从球形空洞的内表面开始向外燃烧。体积反应速率可表示为:

$$\frac{d\lambda}{dt} = -\frac{v}{v} = \frac{4\pi r^2 \cdot r}{\frac{4}{3}\pi b^3} = \frac{3\lambda^{2/3}}{b} r \quad (5)$$

其中,  $r$  是炸药的表面燃烧速率, 可表示为:  $r = a_1 p^{n_1}$ ,

$a_1, n_1$  为待定常数。

通过计算发现<sup>[4]</sup>, Kim 所提出的快反应项不能较好的描述非均质炸药在高压下的反应过程, 有必要对其进行改进, 引入了新的高压项<sup>[5]</sup>:

$$\frac{d\lambda}{dt} = G p^z (1 - \lambda)^x \quad (6)$$

其中,  $G, z, x$  为待定常数, 它能够很好地描述高压下的反应过程。

因此总的反应速率方程是:

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{d\lambda_h}{dt} + \frac{3\lambda^{2/3}}{b} a_1 p^{n_1} + G p^z (1 - \lambda)^x \quad (7)$$

方程(7)加上合适的参数值, 就可以描述 PBX-9404 的化学反应过程。它反映了炸药材料属性、加载压力、初始孔隙度以及颗粒尺寸的影响。把它加入到一维流体动力学差分程序 SSS<sup>[6]</sup> 中, 待定参数有  $a_1, n_1, G, z, x$ , 采用遗传算法来拟合各参数。如无特殊说明, 本文中的物理量均为 (cm-g- $\mu$ s) 单位制。

### 3 参数拟合与结果分析

由于缺少准确的实验数据, 本文取 PBX-9404 一维冲击起爆过程中, 利用 Forest Fire 反应速率在 SSS 程序中计算出的压力曲线作为实验曲线来拟合改进的 Kim 反应模型的参数。

遗传优化的基本处理过程如下:

- (1) 在给定的参数空间中随机产生  $N$  个可能解组成初始解群;
- (2) 计算出每个个体的适应度, 按照适应度比例方法从当前群体中选取  $N$  个个体(允许有重复个体存在)作为父代来产生新一代个体;
- (3) 对选取的父代个体进行随机配对, 并以较大的交叉概率进行两点交叉操作, 以较小的概率对交叉后的个体进行变异操作, 从而得到新一代个体;
- (4) 检验是否满足程序终止条件, 若不满足, 返回到(2)继续迭代。

计算到 84 代的时候, 得到  $a_1 = 0.0093, n_1 = 0.723, G = 3300, z = 3.4, x = 1.18$ 。图 4 是用拟合出来的参数计算出的结果与“实验”结果的比较。

由图 4 可以看出, 两条曲线的差别已经很小, 这说明通过遗传算法已经得到了比较满意的结果。同时, 注意到两条曲线在最大值附近略有差别, 这主要是由于两种反应速率模型的机理不同, 存在一定差别是必然的。

为了进一步验证这种方法的可行性, 把两种反应速率模型计算出的不同拉格朗日位置的压力剖面进行

比较(见图5),由图5可见,两组曲线符合较好。

#### 4 PBX-9404 一维冲击起爆计算结果

将本文中的反应速率方程加入到一维有限差分程序 SSS 中,对厚铝板以  $850 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  的速度撞击 PBX-9404 炸药引起的冲击起爆过程进行了计算,撞击界面压力约为  $4.3 \text{ GPa}$ 。

图6是  $a = 0.0039$ 、 $b = 0.01$  时 PBX-9404 的冲击起爆结果,图6a和6b分别显示了不同拉格朗日质点的压力剖面和速度剖面,曲线右下角的数字为与该剖面对应的拉格朗日质点位置(单位:cm)。从图中可以看出,与均质炸药不同,冲击波在非均质炸药中传播,波阵面的压力只有轻微的增长,在波后形成热点,成为反应的起源,这些热点经过一段时间后由于释能作用形成了波后的压力峰,压缩阵面加速和增压,压力峰不断向阵面靠拢,最后形成了爆轰。

图7是其它条件相同炸药颗粒粗细不同时压力剖面的比较。其中图7a是距撞击面  $2 \text{ mm}$  处的压力剖

面的比较,图7b是不同位置处的压力剖面的比较。从图中可以看出,颗粒粗细对起爆过程的影响:(1)细颗粒炸药相对粗颗粒炸药难以点火,但是更容易转变成爆轰,这主要是由于:热传导和粘性。同样的热传导,细颗粒炸药中,热点尺寸小,它的能量很容易散开,因此,会减慢反应的增长。同时,细颗粒炸药难以压缩,也就是粘性大。因此细颗粒炸药开始阶段反应缓慢,但是后来由于燃烧的面积较大使得反应加速。这与 Setchell<sup>[7]</sup> 所观测到的实验现象一致。(2)细颗粒炸药波阵面的压力几乎没有增长,波后的压力增长很快,而粗颗粒炸药波阵面处的压力增长相对较大,这主要是由于粗颗粒炸药产生的热点较大,这些热点释放的能量直接推动了阵面压力的增长,而细颗粒炸药尽管热点的数量相对较多,但是它们的体积较小,向周围介质热传导较快,这时热点在波阵面处的直接释能作用不大,经过一段时间后,由于燃烧面积较大,反应较快,波后的压力峰追赶阵面产生爆轰,这与 Taylor<sup>[8]</sup> 的实验结果相符。

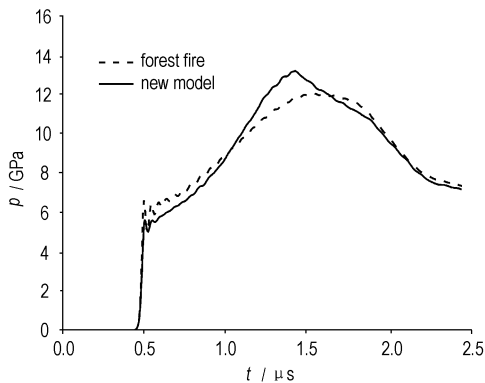


图4 拟合点压力剖面的比较

Fig. 4 Comparison of  $p(t)$  at the exact position

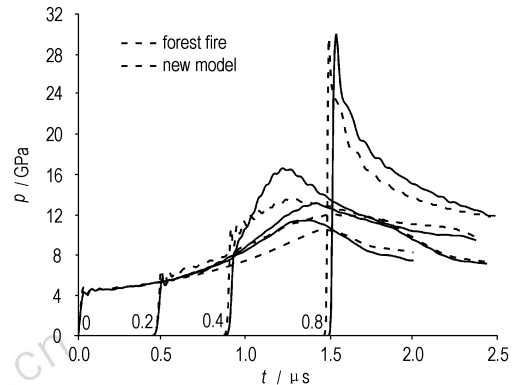
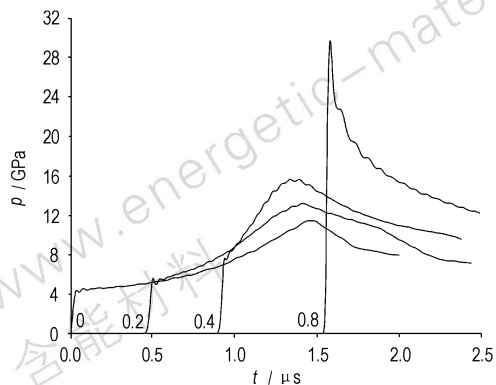
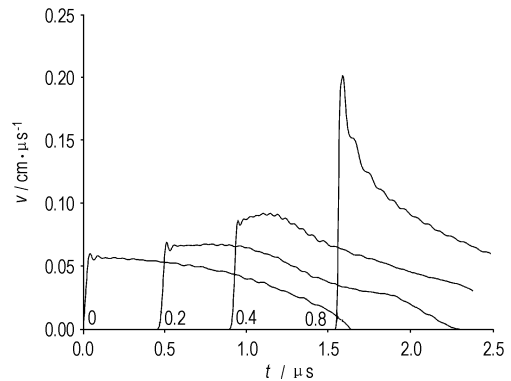


图5 不同拉格朗日质点的压力剖面的比较

Fig. 5 Comparison of  $p(t)$  at the different position



a  $p(t)$  at different Lagrange positions



b  $V(t)$  at different Lagrange positions

图6 内外半径分别是  $0.0039$  和  $0.01 \text{ cm}$  时的计算结果

Fig. 6 The results with  $a = 0.0039$  and  $b = 0.01$

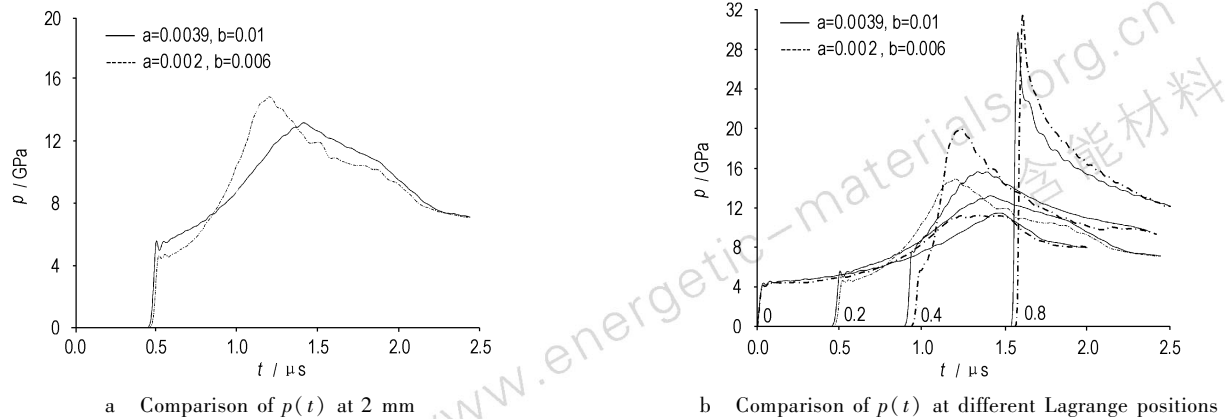


图7 炸药颗粒粗细不同孔隙度不同的结果比较

Fig.7 Comparison of the results with different particle sizes

## 5 讨论

(1) 用遗传算法拟合出的曲线与原来的曲线在波形增长方式、到爆轰距离以及达到稳定爆轰之后的状态都符合较好,这说明采用这种方法来拟合反应速率方程的参数是完全可行的。

(2) 由于缺少准确实验数据,文中得到的参数并不具有普适性,本文主要是检验这种方法的可行性,在获得准确的实验数据之后,采用同样的方法,就可以得到合理的参数值。

(3) 利用改进的微观化学反应速率方程,可以较好地描述 PBX-9404 炸药的冲击起爆过程,它可以解释材料属性、炸药颗粒大小以及孔隙度等对冲击起爆过程的影响。

### 参考文献:

- [1] Tarver C M, Hallquist J O, Erickson L M. Modeling short pulse duration shock initiation of solid explosives [A]. Proc of 8th Int Symp on Detonation [C], 1985. 951-961.
- [2] Johnson J N, Tang P K, Forest C A. Shock-wave initiation of heteroge-

neous reactive solids [J]. *J Appl Phys*, 1985, 57(9): 4323 - 4334.

- [3] Kim K. Development of a model of reactive rates in shocked composite explosives [A]. Proc. of 9th Int. Symp. on Detonation [C], 1989. 593 - 603.
- [4] 田占东. 固体炸药冲击起爆化学反应动力学研究 [D]. 长沙: 国防科技大学硕士论文, 2003. 29 - 37.
- TIAN Zhan-dong. A mesomechanic model of shock initiation in solid heterogenous explosive [D]. Changsha: Master Degree Paper of National University of Defense Technology, 2003. 29 - 37.
- [5] 张振宇, 卢芳云, 王志兵, 等. PBX-9404 炸药高压反应速率方程的研究 [J]. 爆炸与冲击, 1999, 19(4): 360 - 364.
- ZHANG Zhen-yu, LU Fang-yun, WANG Zhi-bing, et al. Studies on high-pressure reaction rate of PBX-9404 [J]. *Explosion and Shock Waves*, 1999, 19(4): 360 - 364.
- [6] 孙承伟. 一维冲击波和爆轰波计算程序 SSS [J]. 计算物理, 1986, 3(2):
- [7] Setchell R E. Micro structural effects in shock initiation of granular explosives [A]. Proc. of 1st ISPE [C], Beijing, 1987. 635 - 643.
- [8] Taylor B C, Ervin L H. Separation of ignition and buildup to detonation in pressed TNT [A]. Proc. of 6th Int. Symp. on Detonation [C], 1976. 3 - 10.

## A Mesomechanic Model of Shock Initiation in PBX-9404 Explosive

TIAN Zhan-dong, ZHANG Zhen-yu

(Institute of Technical Physics, College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

**Abstract:** A mesomechanic reaction model of heterogeneous explosives under shock wave was established. In this model, "hot spot" was formed as a result of the elastic-viscoplastic collapse induced by shock, while the growth stage started from an inner combustion and was followed by an outer surface grain combustion. Then the model was implemented in one-dimensional reactive hydrodynamic program SSS and a genetic algorithm was used to decide the target parameters in the model of reaction rate in PBX-9404.

**Key words:** explosion mechanics; genetic algorithm; shock initiation; reaction rate