文章编号：1000-5773(2010)04-0311-05

PBX-9502 炸药爆轰反应速率模型研究*

陈 军[1]，曾代朋[1]，张振宇[2]

(1. 中国工程物理研究院流体物理研究所，四川绵阳 621900；
2. 国防科学技术大学理学院技术物理研究所，湖南长沙 410073)

摘要：利用高能炸药爆轰反应的拉格朗日分析方法，得到了一个形式简单的 PBX-9502 炸药的爆轰反应速率方程。运用该速率方程，计算了 PBX-9502 炸药爆轰波反应区的纵向结构，并与三项式点火增长模型的计算结果及实验结果进行比较。结果表明：该爆轰反应速率方程能很好地模拟 PBX-9502 炸药爆轰波反应区的纵向结构。

关键词：PBX-9502 炸药；爆轰反应；拉格朗日法；反应速率
中图分类号：O381 **文献标识码**：A

1 引 言

由于对冲击波阵面后的热点发展知之甚少，且无法直接观察，因此人们尝试着直接构造唯象的、宏观尺度连续的反应速率模型。但是，这些模型几乎都存在一个共同局限，即：为了满足冲击起爆和爆轰波传播期间不同细观的化学反应机制，采用两套参数分别模拟起爆过程和爆轰过程[1]。

爆轰反应区具有一定宽度，而有限宽度现象对于炸药的爆轰过程产生一定效应，例如：影响爆轰波速度，进而影响爆轰波对材料的做功能力；限制炸药爆轰的最小尺寸和爆轰波传播过程中波阵面的弯曲程度。本研究利用高能炸药爆轰反应的拉格朗日分析方法，得到一个形式简单的、能考虑有限化学反应速率影响的 PBX-9502 炸药爆轰反应速率方程；结合 DYNA 2D 有限元程序，对 PBX-9502 炸药爆轰波反应区的纵向结构进行一维计算，并将计算结果与实验结果、三项式点火增长模型的计算结果进行对比，检验PBX-9502炸药爆轰波反应速率方程的正确性和有效性。

2 PBX-9502 炸药爆轰反应区流场的拉格朗日分析

描述一维定常爆轰波运动的拉格朗日运动方程为

$$\dot{v}+(v_0/D)\dot{u}=0 \tag{1}$$

$$\dot{u}-(v_0/D)\dot{p}=0 \tag{2}$$

式中：u 为粒子速度，v 为比容，v_0 为初始比容，p 为压力，D 为定常爆轰波速度。D 不小于自持爆轰波速度 D_{CJ}，即 $D\geqslant D_{CJ}$。当 $D=D_{CJ}$ 时，为正常 CJ 爆轰；当 $D>D_{CJ}$ 时，为超压爆轰。

利用爆轰反应区中混合物的能量平衡方程、状态方程以及混合法则，可以得到反应产物(下标 g)、炸药(下标 s)及混合物的反应方程[2]

$$\dot{v}_g=D_{vg}\dot{p}+E_{vg}\dot{\lambda} \tag{3}$$

$$\dot{v}_s=D_{vs}\dot{p}+E_{vs}\dot{\lambda} \tag{4}$$

$$\dot{v}=D_v\dot{p}+E_v\dot{\lambda} \tag{5}$$

* **收稿日期**：2009-10-22；**修回日期**：2010-02-02
基金项目：国防基础科研计划项目(B1520110002)
作者简介：陈 军(1973－)，男，博士，副研究员，主要从事爆轰物理研究. E-mail：chenjun@caep.ac.cn

式中:λ 为反应质量分数;D_{vg}、D_{vs}、D_v、E_{vg}、E_{vs}和 E_v 为系数,与炸药和爆轰产物的状态方程及反应机制有关。联立(1)式～(5)式,可以得到常微分方程组[2]

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\lambda} = \dfrac{v_0}{D} K_\mathrm{p} & (6a) \\ \dfrac{\mathrm{d}v_\mathrm{s}}{\mathrm{d}\lambda} = D_{vs} K_\mathrm{p} + E_{vs} & (6b) \\ \dfrac{\mathrm{d}v_\mathrm{g}}{\mathrm{d}\lambda} = D_{vg} K_\mathrm{p} + E_{vg} & (6c) \\ \dfrac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}\lambda} = D_T K_\mathrm{p} + E_T & (6d) \end{cases}$$

式中:$K_\mathrm{p} = -E_v/(D_v + v_0^2/D^2)$。(6)式中的系数与假设的化学反应机制有关,其中(6d)式只对体积反应机制下的热平衡假设成立。在表面燃烧反应机制下,只需联立求解(6a)式～(6c)式即可,此时系数 K_p 与温度 T 无关。

以爆轰波阵面的 VN 点为起始点,以反应区末端的 CJ 点为结束点,在此区间对(6)式进行积分,得到定常爆轰波反应区中的 $u(\lambda)$。将 $u(\lambda)$代入(1)式和(2)式,即可求出 $p(\lambda)$和 $v(\lambda)$。$u(\lambda)$、$p(\lambda)$和 $v(\lambda)$与爆轰反应区中反应速率方程的具体形式无关。

表 1 列出了计算中使用的 PBX-9502 炸药及其爆轰产物的 JWL 状态方程参数[3],其中:ρ_0 为炸药的典型压制密度,E_0 为单位体积炸药的初始内能,w_s、A_s、B_s、$R_{1\mathrm{s}}$、$R_{2\mathrm{s}}$、$c_{V\mathrm{s}}$为炸药的状态方程参数,w_g、A_g、B_g、$R_{1\mathrm{g}}$、$R_{2\mathrm{g}}$、$c_{V\mathrm{g}}$为爆轰产物的状态方程参数。CJ 爆速 D_CJ 和 CJ 压力 p_CJ 分别取7.710 km/s和30.2 GPa,稳定爆轰时化学反应区的宽度为 2～3 mm[4]。

表 1 PBX-9502 炸药及其爆轰产物的 JWL 状态方程参数

Table 1 JWL equation of state parameters for PBX-9502 explosive and its product

ρ_0/(g/cm^3)	w_s	A_s/(GPa)	B_s/(GPa)	$R_{1\mathrm{s}}$	$R_{2\mathrm{s}}$	$c_{V\mathrm{s}}$/(MPa/K)
1.895	0.893 8	63 207	−4.472	11.3	1.13	2.487
E_0/(GPa)	w_g	A_g/(GPa)	B_g/(GPa)	$R_{1\mathrm{g}}$	$R_{2\mathrm{g}}$	$c_{V\mathrm{g}}$/(MPa/K)
6.9	0.5	1 361.77	71.99	6.2	2.2	1.0

根据未反应炸药的 JWL 状态方程以及炸药的冲击 Hugoniot 关系,计算得到 p_VN 和 u_VN 分别为 37.23 GPa和 2.545 km/s,体积反应机制下的 p_CJ 和 u_CJ 分别为 28.54 GPa 和 1.951 km/s,表面燃烧反应机制下的 p_CJ 和 u_CJ 分别为 28.55 GPa 和 1.952 km/s。

图 1 为计算得到的 PBX-9502 炸药爆轰波反应区的 $p(\lambda)$和 $u(\lambda)$曲线。显然,PBX-9502 炸药爆轰波反应区中 $p(\lambda)$和 $u(\lambda)$与爆轰体积反应机制和表面燃烧反应机制无关。

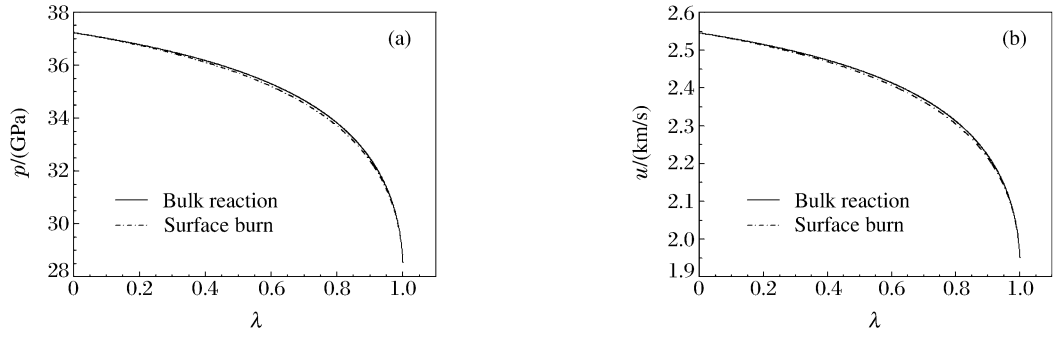


图 1 爆轰波反应区中 $p(\lambda)$和 $u(\lambda)$曲线

Fig. 1 $p(\lambda)$ and $u(\lambda)$ curves in detonation reaction zone

3　PBX-9502 炸药爆轰反应的实验结果

在 PBX-9502 炸药的爆轰实验中,采用 10 个量计(G1～G10)测量粒子速度,量计埋入深度从碰撞界面(G1)起到深入靶材7.46 mm(G10),碰撞界面的压力为16.27 GPa。图 2 为实验测得的 PBX-9502 炸药从冲击起爆到爆轰转变的粒子速度曲线。从图中的粒子速度历史可以看到由弹丸碰撞能量支持的平面冲击波向炸药释放能量支持的爆轰波的转变。位于碰撞界面的量计 G1 记录了冲击波通过炸药的全过程,而量计 G5～G10 则记录了类似于典型 ZND 爆轰结构的波形。考虑到 PBX-9502 炸药的爆轰增长过程很长,假设粒子速度曲线在达到正常爆轰之前波形不变,对于图 2 中 G10 记录的粒子速度曲线(见图 3(a)),取波阵面的质速值为 PBX-9502 炸药 VN 点的对应值,将曲线在爆轰反应区内的部分进行拟合,得到 PBX-9502 炸药爆轰反应区的粒子速度$u(t)$曲线,如图 3(b)所示。该曲线的终点取 PBX-9502 炸药的 CJ 点,选定 VN 点和 CJ 点后,得到的反应区宽度约为 0.2 μs。

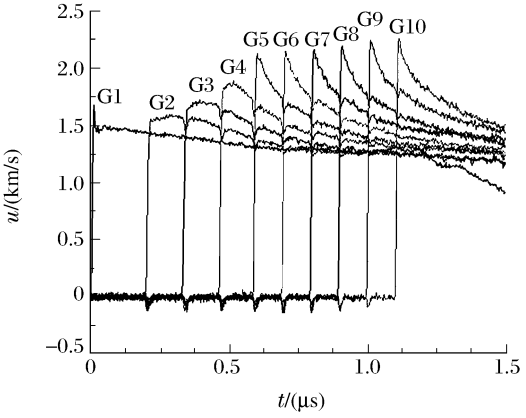


图 2　PBX-9502 炸药粒子速度的实验 $u(t)$曲线

Fig. 2　Experimental particle velocities of explosive PBX-9502

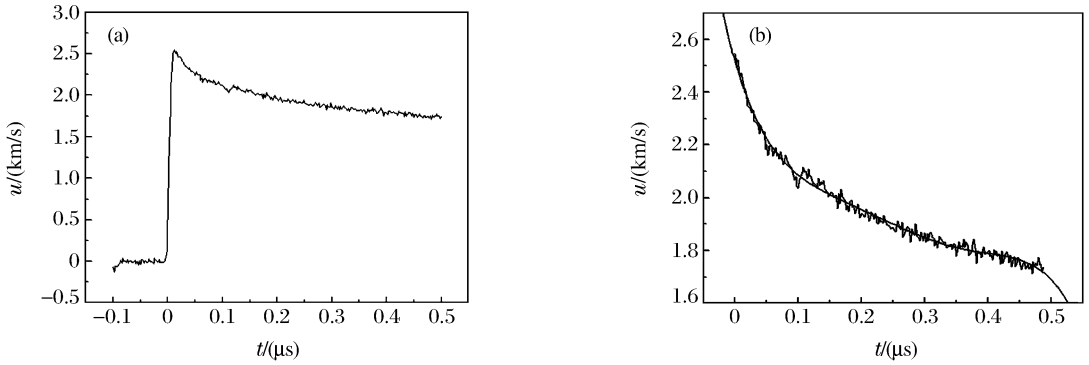


图 3　PBX-9502 炸药爆轰反应区的 $u(t)$曲线

Fig. 3　$u(t)$ curve in detonation reaction zone for explosive PBX-9502

4　PBX-9502 炸药的爆轰反应速率方程

由拉格朗日法得到的 PBX-9502 炸药爆轰反应区的 $u(\lambda)$和 $u(t)$,可以得到爆轰反应区的 $\lambda(t)$曲线,如图 4 所示。将 $\lambda(t)$进行微分,得到爆轰反应区的 $\dot{\lambda}(t)$ 曲线,见图 5。

显然,在求出爆轰波反应区中的 $p(\lambda)$、$u(\lambda)$以及它们之间的关系后,根据实验测出的爆轰波反应区中的 $p(t)$或 $u(t)$,采用数值方法就可以获得爆轰波反应区中 p、u、v、λ、$\dot{\lambda}$ 等参量的流场分布以及它们之间的相互关系。

通过分析爆轰反应区中 $\dot{\lambda}(t)$ 与 p、λ 的关系,可以确定 PBX-9502 炸药的爆轰反应速率方程为

$$\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}=Gp^{z}(1-\lambda)^{x} \tag{7}$$

式中:G、z、x 为参数。利用非线性优化方法,得到 $z=1.973$,$x=1.240$,$G=0.051\ (\mathrm{GPa})^{-1.973}\cdot\mu\mathrm{s}^{-1}$。

根据(7)式,利用二维有限元程序 DYNA 2D,对厚度为 1.0 cm 的 Kel-F 材料板以 3 970 m/s 的速度撞击 PBX-9502 炸药引起的冲击起爆过程进行了计算,撞击界面压力约为 23.0 GPa。距撞击界面不

同位置处的 $u(t)$、$p(t)$的计算结果如图 6 所示。作为比较,采用三项式点火增长模型[3]对相同情况进行了计算,结果如图 7 所示。

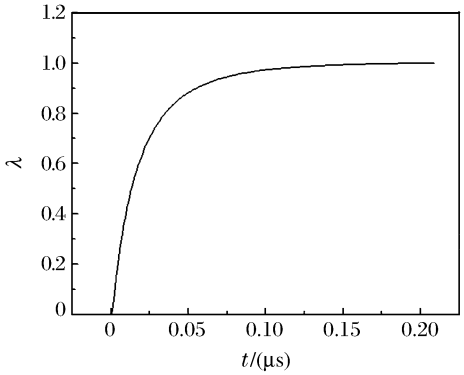


图 4 PBX-9502 炸药爆轰反应区的 $\lambda(t)$曲线

Fig. 4 $\lambda(t)$ in detonation reaction zone for explosive PBX-9502

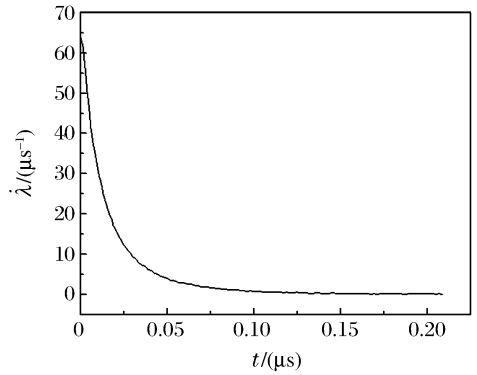


图 5 PBX-9502 炸药爆轰反应区的 $\dot{\lambda}(t)$ 曲线

Fig. 5 $\dot{\lambda}(t)$ in detonation reaction zone for explosive PBX-9502

将两组计算结果中距离撞击面 1.6 cm 处的爆轰波反应区的粒子速度剖面与实验粒子速度剖面进行比较,如图 8 所示。可以看出,两个模型均能很好地描述 PBX-9502 炸药爆轰波反应区的纵向结构。

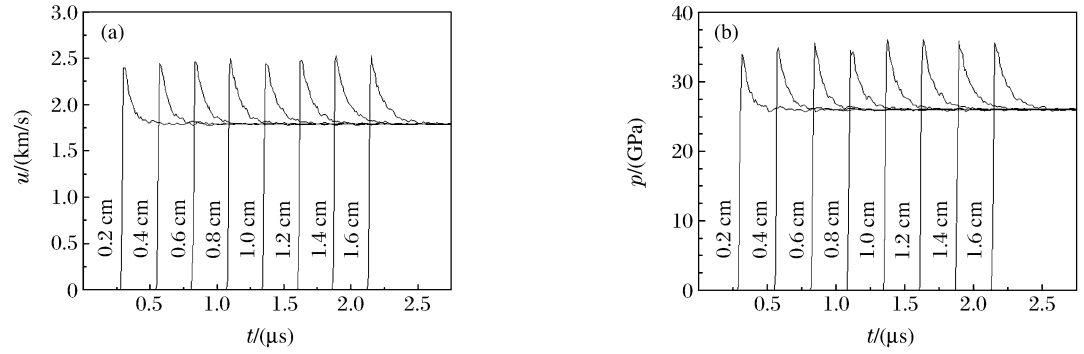


图 6 采用本模型计算得到的 $u(t)$曲线

Fig. 6 Calculated $u(t)$ of present model

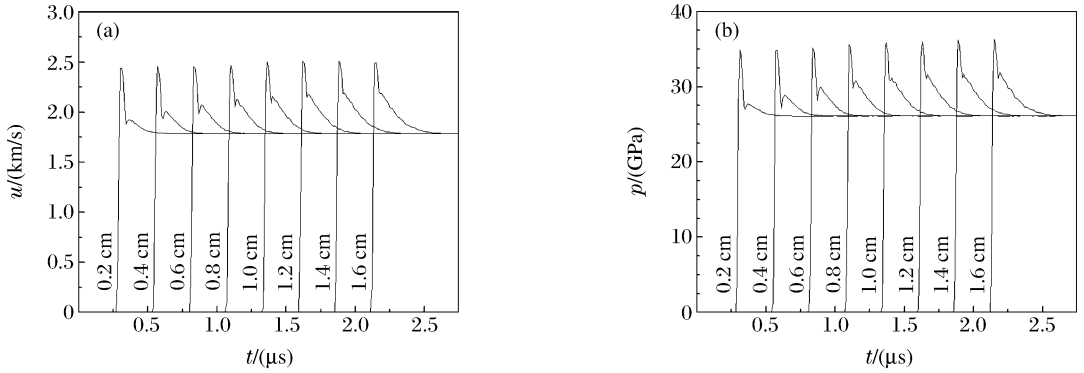


图 7 三项式点火增长模型计算得到的 $u(t)$曲线

Fig. 7 Calculated $u(t)$ of ignition and growth model

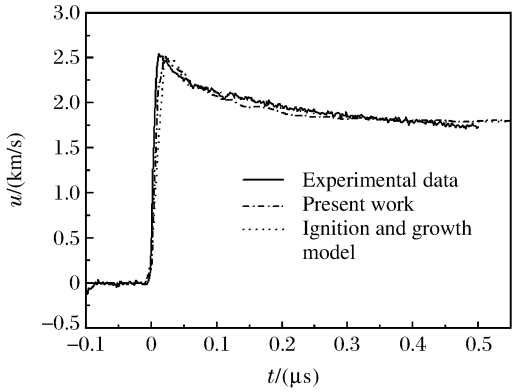


图 8　两种模型的计算结果与实验结果的比较

Fig. 8　Comparison between calculated results of two models and experimental data

5　结　论

通过对 PBX-9502 炸药爆轰波反应区进行拉格朗日分析,得到了适合于描述 PBX-9502 炸药爆轰反应的、形式简单的反应速率方程。该反应速率方程可以很好地模拟 PBX-9502 炸药爆轰波反应区的纵向结构,因此,可将其应用于爆轰反应区有限宽度效应的相关研究。

References:

[1] Tarver C M. Ignition and Growth Modeling of LX-17 Hockey Puck Experiments [J]. Propell Explos Pyrot, 2005, 30(2): 109-117.

[2] Zhang Z Y, Huan S, Lu F Y, et al. Lagrangian Analysis of Flow Field in Detonation Reaction Zone of High Explosives [J]. Explosion and Shock Waves, 1996, 16(3): 271-277. (in Chinese)
张振宇,浣　石,卢芳云,等. 高能炸药爆轰波反应区流场的拉格朗日分析方法 [J]. 爆炸与冲击, 1996, 16(3): 271-277.

[3] Tarver C M, McGuire E M. Reactive Flow Modeling of the Interaction of TATB Detonation Waves with Inert Materials [A]//Proceedings of the 12th International Symposium Detonation [C]. San Diego, 2002.

[4] Dobratz B M, Crawford P C. Properties of Chemical Explosives and Explosive Simulants, UCRL-52997 [R]. California: Lawrence Livermore National Laboratories, 1985.

A Reaction Rate Model of PBX-9502 Detonation

CHEN Jun[1], ZENG Dai-Peng[1], ZHANG Zhen-Yu[2]

(1. *Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang* 621900, *China*;
2. *Institute of Technical Physics, College of Science, National University of Defense Technology, Changsha* 410073, *China*)

Abstract: Using Lagrange analysis method for high explosives, a simple detonation reaction rate model of explosive PBX-9502 was proposed. With this model, the longitudinal structure of detonation reaction zone of explosive PBX-9502 was obtained. By Comparing with experimental results and calculated results of ignition and growth model, it shows that current model has good feasibility and validity for the longitudinal structure of detonation reaction zone of PBX-9502.

Key words: explosive PBX-9502; detonation reaction; Lagrange analysis method; reaction rate