高 压 物 理 学 报
CHINESE JOURNAL OF HIGH PRESSURE PHYSICS
DOI：10.11858/gywlxb.20251254

# Lee-Tarver 反应速率模型的优化开发与应用*

段继[1*]，李劲[2]，智小坤[3]，张树霞[1]，杨筱[1]，周捷[1]
(1. 中北大学机械工程学院，山西 太原 030051；
2. 重庆长安望江工业集团有限公司，重庆 401120；
3. 晋西车轴股份有限公司，山西 太原 030027)

**摘　要：**针对 Lee-Tarver 点火增长反应速率方程参数多（15 个）且不易标定的不足，在三项式结构的基础上引入半周期三角函数对模型进行优化。新速率方程优化了点火项的连续性，将增长项和完成项的形状因子最大数值限制为 1，减弱了比例系数 $Grow_1$ 和 $Grow_2$ 与形状因子的参数补偿，消除了三项式的反应度极限，反应速率方程参数降低至 10 个，提高了参数标定的效率。基于 LS-Dyna 对改进的点火增长模型进行二次开发，对比计算了 Lee-Tarver 模型和优化模型的冲击起爆仿真结果，炸药内部压力和反应度仿真结果高度一致，验证了模型开发的正确性。基于炸药驱动金属板试验结果，应用 LS-OPT 标定了优化的点火增长模型参数，并统计了速率方程参数的敏感度，提炼出了关键参数，为进一步提高参数标定效率提供参考。对比炸药驱动金属板试验和仿真结果，仿真计算误差小于 3%，验证了标定参数的工程正确性。应用改进的点火增长模型，结合子弹/破片撞击弹药的安全性试验，研究了子弹/破片撞击下弹药的冲击起爆响应特性。子弹撞击弹药后 66 μs 内炸药内部峰值压力达到 0.145 Mbar（爆压的 48.3%），表明炸药未发生爆轰反应；破片撞击条件下，炸药内部峰值压力仅为 0.0079 Mbar，近撞击点反应度大于其他区域，最大反应度仅为 0.01，炸药未起爆。优化模型的仿真结果与试验测试结果的一致性较好，验证了优化开发的点火增长模型的工程应用性。

**关键词：**点火增长模型；参数优化；安全性；二次开发；子弹/破片撞击
**中图分类号：**TJ301；O381；O521.9　　**文献标识码：**A

最新录用，非最终出版稿

机械刺激下弹药的冲击起爆特性是安全性评价的重要依据，而数值仿真是冲击起爆特性研究的重要组成部分，是分析弹药起爆机理、起爆阈值和评价响应等级的主要方法。

炸药冲击起爆过程复杂，仿真结果高度依赖数学模型对机理的表征和模型参数的标定。早期学者探究了炸药冲击起爆机理，目前普遍认可“热点”起爆机理[1]-[3]。基于“热点”起爆机理和连续介质力学模型，发展了表征炸药冲击起爆的宏观现象学反应速率模型，如JTF[4]、Lee-Tarver[5][6]和CREST[7]等。通过冲击起爆相关试验包括炸药爆轰性能测试[8]-[11]、爆轰产物状态方程标定[12][13]、拉格朗日冲击起爆性能试验[14][15]、子弹/破片撞击试验[16][17]等，研究不同条件下炸药的冲击起爆特性，并对模型参数进行标定，实现炸药冲击起爆过程的宏观现象学仿真。为了更好地描述“热点”形成机理，近年来学者从细观角度构建了炸药分子动力学反应速率模型，如基于Arrhenius方程的多尺度模型[18]，局部有序堆积的非晶态模型[19][20]，双球壳空穴塌缩模型[21]，黏塑性孔洞塌陷模型[22]，考虑炸药组分配比、颗粒度、孔隙度的DZK模型[23][24]等，细观反应速率模型能够描述炸药热点形成及其对炸药冲击起爆反应进程的影响，是未来的发展趋势。然而，细观模型计算量巨大，难以应用于跨尺度冲击起爆仿

*收稿日期：2025-11-10；　修回日期：2025-12-24
基金项目：山西省基础研究项目青年项目（202403021222129）
第一作者：段　继（1987－ ），男，博士，副教授，主要从事弹药安全性研究. E-mail：20170089@nuc.edu.cn
通信作者：段　继（1987－ ），男，博士，副教授，主要从事弹药安全性研究. E-mail：20170089@nuc.edu.cn

真。

目前，Lee-Tarver模型仍广泛应用于机械撞击下的弹药安全性研究，仿真分析含能破片[25]、子弹[26]、常规破片[27]等毁伤元撞击下的炸药冲击起爆特性。然而，Lee-Tarver模型唯象参数较多（15个标定参数），参数标定工作量大；受反应分数极限影响，点火项变化在极限处存在数值阶跃，影响计算稳定；增长和完成项的比例系数和形状因子相互影响，导致标定参数相互代偿，增加了参数标定的难度，影响仿真计算的科学性和适用性。

针对Lee-Tarver模型的不足，在三项式结构的基础上引入半周期三角函数，消除了点火项的反应分数极限，优化了速率方程的连续性；将增长项和完成项的形状因子最大数值限制为1，减弱了比例系数$Grow_1$和$Grow_2$与形状因子的相互影响，降低了参数代偿对参数标定的影响；优化的反应速率方程参数降低至10个，提高了参数标定的效率。基于LS-Dyna开发了优化的点火增长模型，通过对比Lee-Tarver模型和优化模型的仿真结果，验证了优化模型的正确性。结合炸药驱动金属板试验数据，应用LS-OPT标定了优化模型的仿真参数，并统计了各参数对于速率方程的敏感度，提炼出关键参数为提高参数标定效率提供参考。对比炸药驱动金属板试验和仿真结果，仿真计算误差小于3%，验证了标定参数的工程正确性。应用优化的点火增长模型，结合子弹/破片撞击试验，分析了弹药的冲击起爆响应特性，定量分析判断了弹药的响应等级，验证了模型的工程应用性。

## 1. 新型点火增长模型优化开发

### 1.1. 新型点火增长速率模型

Lee 和 Tarver 于 1986 年提出了由点火项、增长项和完成项组成的反应速率模型，其数学表达式为[5]：

$$dF/dt = Freq\cdot(1-F)^{Frer}\cdot\left(\frac{\rho}{\rho_0}-1-Ccrit\right)^{Eetal}+Grow_1\cdot(1-F)^{Es1}\cdot F^{Ar1}\cdot P^{em}+Grow_2\cdot(1-F)^{Es2}\cdot F^{Ar2}\cdot P^{en} \tag{1}$$

其中，$\rho_0$是炸药的初始密度；$\rho$是冲击阵面后炸药的密度；*Freq*、*Frer*、*Ccrit*、*Eetal*、$Grow_1$、*Es1*、*Ar1*、*em*、$Grow_2$、*Es2*、*Ar2*、*en* 是与炸药有关的 12 个工程系数，外加三项有效范围极限参数 *FMXIG*、*FMXGR* 和 *FMNGR*，共 15 个参数。

Lee-Tarver 模型的点火项在反应分数 *F* 达到极限时会导致点火项计算值阶跃变化，影响计算稳定性；增长项和完成项的形状因子参数与比例系数相互关联，导致参数补偿，增加了速率方程的标定难度。在 Lee-Tarver 模型三项结构的基础上，引入半周期三角函数，通过三角函数调控速率变化；三角函数的周期性和定幅值特点，优化了增长项和完成项的形状因子函数，减掉了 2 个炸药反应相关的工程系数 *Ar1* 和 *Ar2*，同时取代了极限参数 *FMXIG*、*FMXGR* 和 *FMNGR* 的作用，将模型参数降低至 10 个。优化的点火增长速率方程的数学表达式如式(2)所示：

$$dF/dt = Freq\cdot 0.5\cdot(1+\cos(\pi F/figmax))(\eta_e-1-Ccrit)^{Eetal}+Grow_1\cdot \mathrm{Sin}(\pi F^{Es1})\cdot P^{em}+Grow_2\cdot \mathrm{Sin}(\pi F^{Es2})\cdot P^{en} \tag{2}$$

其中 *F*、$\eta_e$和 *P* 为炸药反应分数、反应物相对密度和压力。新型三项式中的待定参数包括 *Freq*、*figmax*、*Ccrit*、*Eetal*、$Grow_1$、*Es1*、*em*、$Grow_2$、*Es2* 和 *en* 共 10 个参数（比 Lee-Tarver 模型少 5 个参数）。

### 1.2. 模型对比分析

1）点火项对比

图 1 显示了 Lee-Tarver 速率方程和改进的速率方程点火项部分的图形比较。红色曲线为 Lee-Tarver 速率方程的点火项与反应分数 *F* 的函数关系，当反应分数（*F*）达到点火极限 *figmx* 时点火项

最新录用，非最终出版稿

明显不连续；蓝色曲线为改进模型的点火项变化，随着反应分数 $F$ 接近点火极限时，其值平滑地趋近于 0。

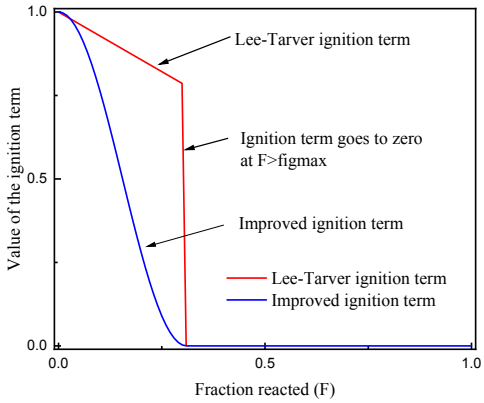



图 1 Lee-Tarver 速率方程和改进的速率方程点火项对比

Fig 1 Comparison of the ignition terms of the Lee-Tarver rate equation and the improved rate equation

2）增长项（完成项）对比

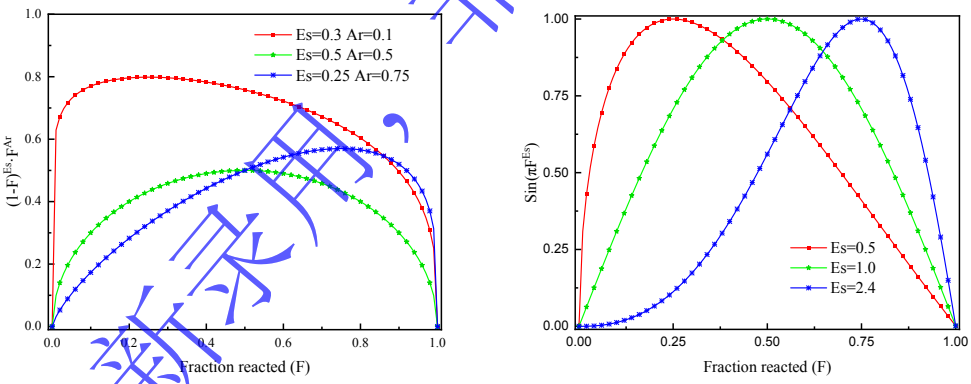
式(3)为 Lee-Tarver 速率方程的增长项和完成项形状因子。

$$(1-F)^{Es}\cdot F^{Ar} \tag{3}$$

公式(4)为基于半周期正弦函数的增长项和完成项形状因子。新的形状因子只包含一个待定参数，且最大值始终为 1，减弱了比例系数 $Grow_1$ 和 $Grow_2$ 与形状因子的相关性，可提高参数标定效率。

$$Sin(\pi F^{Es}) \tag{4}$$

分别取三组形状因子参数值，对比两种形状因子随反应度的变化，如图 2 所示。




(a)Lee-Tarver reaction rate equation (b)Improved reaction rate equation

图 2 形状因子变化曲线

Fig 2 Variation curves of shape factors

图 2(a)显示，Lee-Tarver 模型的三组 $Es$ 和 $Ar$ 值对应的形状因子最大值各不相同，且形状因子的曲线形态变化也较大，在比例系数的影响下，方程波动显著增大，增加了参数标定的难度。

针对此问题，引入半周期正弦函数，将形状因子的最大值限制为 1，图 2(b)显示只通过单一参数 $Es$ 即可实现曲线形状的快速上升与缓慢上升调节，配合比例系数 $Grow_1$ 和 $Grow_2$ 可实现炸药反应快速增长到爆轰的数学表征，消除了速率模型中增长项和完成项的开始和结束限制，减少了标定参数数量，提高了速率方程的稳定性。

最新录用，非最终出版稿

### 1.3. LS-Dyna 二次开发

1) 状态方程

对于炸药的反应物和产物分别使用温度相关的 JWL 状态方程描述。对于炸药的反应物，压力表示为[28]：

$$P_e = R_1 e^{(-R_5/\eta_e)} + R_2 e^{(-R_6/\eta_e)+R_3\eta_e T(R_3=\omega_e C_{V_e})} \tag{5}$$

能量表示为：

$$\varepsilon_e = \frac{R_1}{R_5} e^{(-R_5/\eta_e)} + \frac{R_2}{R_6} e^{(-R_6/\eta_e)} + C_{V_e} T \tag{6}$$

式中$\eta_e$为炸药反应物的相对密度$=\rho_e/\rho_0$，$\rho_e$为炸药固相的密度，$\rho_0$为炸药初始密度，$C_{V_e}$为炸药反应物的比热容，$T$为混合物的平均温度。$R_1$、$R_2$、$R_3$、$R_5$、$R_6$和$\omega_e$为常数。$R_2$一般为负，是炸药固体承受张力。

对于炸药气态产物，压力表示为：

$$P_p = A e^{(-XP_1/\eta_p)} + B e^{(-XP_2/\eta_p)+G\eta_p T(G=\omega_p C_{V_p})} \tag{7}$$

能量表示为：

$$\varepsilon_p = \frac{A}{XP_1} e^{(-XP_1/\eta_p)} + \frac{B}{XP_2} e^{(-XP_2/\eta_p)} + C_{V_p} T \tag{8}$$

式$\eta_p$中为炸药产物的相对密度$=\rho_p/\rho_0$，$\rho_p$为炸药气态产物的密度，$\rho_0$为炸药初始密度，$C_{V_p}$为炸药产物的比热容。$A$、$B$、$XP_1$、$XP_2$、$G$ 和$\omega_p$为常数。

2）温度计算

引入温度是为了考虑反应速率可能依赖于温度，并加强混合物的热平衡假设。混合物的总内能$\varepsilon$表示为：

$$\varepsilon = (1-F)\varepsilon_e + F\varepsilon_p + (1-F)Q \tag{9}$$

其中$\varepsilon_e$和$\varepsilon_p$分别由未反应和气体产物状态方程计算得出，$F$ 是已经反应的炸药质量分数，$Q$是未反应物质释放的化学能。

增量形式的能量方程表示为：

$$\begin{aligned} d\varepsilon = &\left[(1-F)\frac{D\varepsilon_e}{Dv}\bigg|_{T,F} + F\frac{D\varepsilon_p}{Dv}\bigg|_{T,F}\right]dv \\ &+\left[(1-F)\frac{D\varepsilon_e}{DT}\bigg|_{v,F} + F\frac{D\varepsilon_p}{DT}\bigg|_{v,F}\right]dT \\ &-\left[\varepsilon_e - \varepsilon_p + Q - (1-F)\frac{D\varepsilon_e}{DF}\bigg|_{T,v} - F\frac{D\varepsilon_p}{DF}\bigg|_{T,v}\right]dF \end{aligned} \tag{10}$$

整理式(10)得：

$$C_v dT = d\varepsilon - J dv + H dF \tag{11}$$

其中

$$C_v = (1-F)\frac{D\varepsilon_e}{DT}\bigg|_{v,F} + F\frac{D\varepsilon_p}{DT}\bigg|_{v,F}$$

最新录用，非最终出版稿

$$J=(1-F)\left.\frac{D\varepsilon_e}{Dv}\right|_{T,F}+F\left.\frac{D\varepsilon_p}{Dv}\right|_{T,F}$$

$$H=\varepsilon_e-\varepsilon_p+Q-(1-F)\left.\frac{D\varepsilon_e}{DF}\right|_{T,v}-F\left.\frac{D\varepsilon_p}{DF}\right|_{T,v}$$

根据热力学第一定律得：

$$d\varepsilon=-(P+q)dv \tag{12}$$

其中，$q$ 表示单位体积的热量。因此，式(11)变换为：

$$C_v dT=-(P+q+J)dv+HdF \tag{13}$$

由式(13)可求出，反应分数 $F$ 不变的情况下的流体动力温度变化和体积 $v$ 不变情况下的化学反应温度变化。

3）反应材料混合法则

反应材料被视为由未反应的固体爆炸物（反应物）和气态反应产物组成的两种共存相的混合物。根据反应的质量分数 $F$，使用简单的混合物定律将混合物的相对体积表示为各相相对体积的加权和，即：

$$v=(1-F)v_e+Fv_p \tag{14}$$

发生反应的炸药质量分数 $F$ 从 0 到 1，其中 $F=0$ 表示没有反应（固体未反应炸药），$F=1$ 表示完全反应（所有产物）。对每一相采用合适的状态方程，并假设反应物和生成物的压力处于热力学平衡，即：

$$P(v,T,F)=P_e(v_e,T)=P_p(v_p,T) \tag{15}$$

其中 $T$ 是混合物的平均温度。反应物和生产物的相对体积分别由下式给出：

$$v_e=\frac{1}{\eta_e}=\frac{\beta}{(1-F)\eta} \tag{16}$$

$$v_p=\frac{1}{\eta_p}=\frac{1-\beta}{F\eta} \tag{17}$$

其中，$\eta$为混合物的相对密度或压缩量（$=\rho/\rho_0$），$\rho_0$为初始密度，$\eta_e$和$\eta_p$分别为反应物和产物的相对密度，$\beta$为反应物对实际体积分数（$=\upsilon_e/\upsilon$）。体积分数$\beta$从 1 下降到 0，其中$\beta=1$表示所有反应物，$\beta=0$表示所有气态产物。

4）二次开发流程

基于 LS-Dyna 平台，创建包含 EOS 子例程的自定义可执行文件。将上述状态方程、温度计算和优化的反应速率构型，通过关键字输入卡片组定义为*EOS_USER_DEFINED，输入参数变量调用该子例程，实现用户自定义计算。用户自定义状态方程的开发流程如图 3 所示。

最新录用，非最终出版稿

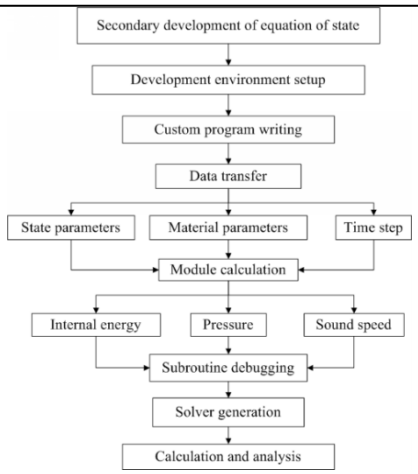



图 3 二次开发流程

Fig 3 Workflow of the secondary development

## 2. 优化模型与 Lee-Tarver 模型对比验证

为了验证新型点火增长模型的正确性，基于文献[29]关于 LX-04 的冲击起爆研究结果，将 Lee-Tarver 模型和新型点火增长模型计算的反应分数和多点压力变化历程进行对比。

### 2.1. 计算模型

建立与文献相同的二维裸炸药冲击起爆模型，模型包括破片、炸药和空气域，仿真模型如图 4 所示。炸药为 LX-04，尺寸为 $\Phi$40mm × 30mm。破片材料为黄铜，尺寸为 $\Phi$12.7mm × 22mm，网格尺寸 0.125mm。空气边界定义为无反射边界。定义 7 个拉格朗日粒子监测，其间隔为 0.5cm，在对称轴沿装药长度分布（0、0.5、1.0、1.5、2.0、2.5 和 3.0cm）。

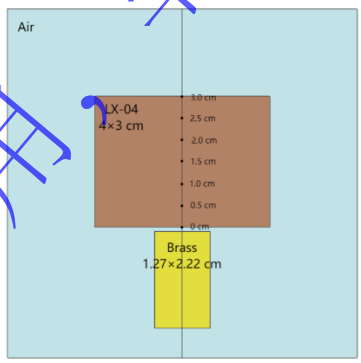



图 4 破片冲击裸药模型及测点分布

Fig 4 Model of Fragment impact on bare explosive and distribution of gauge points

破片、炸药和空气仿真参数如表 1、表 2 和表 3 所示，单位为 cm-g-μs。

表 1 黄铜材料 Johnson-Cook 本构模型参数[29]

Table 1 Parameters of the Johnson-Cook Constitutive model for brass

| $\rho_0$ | $A$ | $B$ | $C$ | $n$ | $m$ | $T_m$ | $C_p$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 8.52 | 0.00112 | 0.00505 | 0.009 | 0.42 | 1.68 | 1189 | 3.85e-6 |

表 2 空气*MAT_NULL 模型参数[29]

Table 2 Parameters of the MAT_NULL model for air

| $\rho_0$ | $PC$ | $MU$ |
|---|---|---|
| 0.00129 | -3e-8 | 1.68e-8 |

最新录用，非最终出版稿

表 3 空气*EOS_LINEAR_POLYNOMIAL 状态方程参数[29]

Table 3 Parameters of the EOS_LINEAR_POLYNOMIAL for air

| $C_0$ | $C_1$ | $C_2$ | $C_3$ | $C_4$ | $C_5$ | $C_6$ | $E_0$ | $V_0$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0.4 | 0.4 | 0 | 2.53e-6 | 2 |

基于文献[31]关于 LX-04 炸药点火增长模型参数，应用 LS-OPT 中前馈神经网络空间采集的方法，对改进点火增长模型参数进行优化标定，优化参数如表 4 所示。

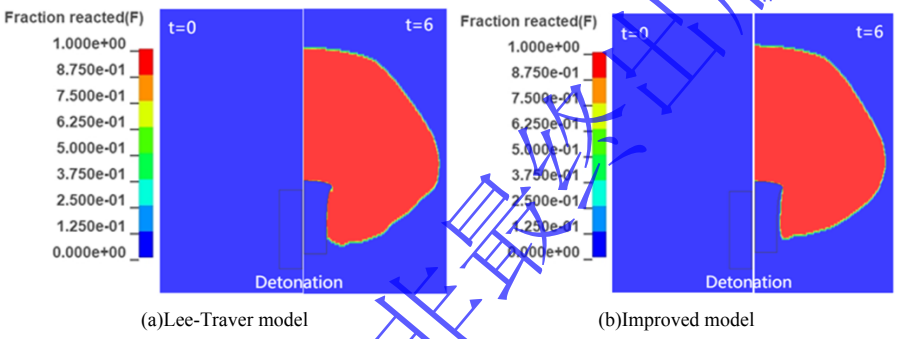
表 4 LX-04 改进模型状态方程参数

Table 4 Parameters of the improved equation of state model for LX-04

| *figmax* | *Freq* | *Ccrit* | *Eetal* | $Grow_1$ |
|---|---|---|---|---|
| 0.5 | 6e6 | 0.075 | 7 | 220 |
| *Es1* | *em* | $Grow_2$ | *Es2* | *en* |
| 0.67 | 2 | 320 | 0.888 | 2.0 |

## 2.2. 仿真结果对比

Lee-Tarver 模型和新型点火增长模型计算的破片冲击裸装药反应分数结果如图 5 所示。




(a)Lee-Traver model (b)Improved model

图 5 t=0μs、t=6.0μs 时炸药反应分数计算结果

Fig 5 Calculation results of reaction fraction of explosive at t=0μs and t=6.0μs

两种模型计算的炸药反应度云图如图 5 所示，在 t = 0μs 和 t = 6.0μs 时刻，Lee-Tarver 模型与改进模型的炸药反应度具有较好一致性。

不同监测点处的压力曲线如图 6 所示。

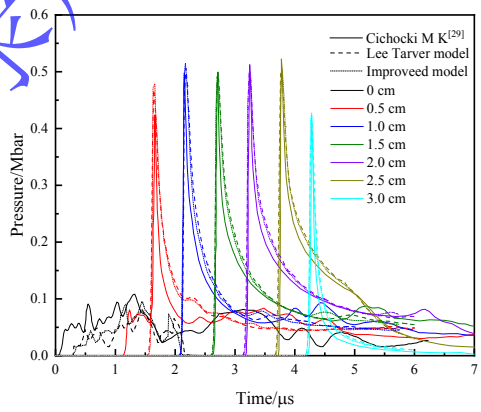



图 6 830 m/s 冲击速度下炸药离散位置的压力图

Fig 6 Pressure histories at discrete positions of explosive under impact velocity of 830 m/s

由图 6 可知，文献[29]中 7 个拉格朗日示踪粒子的压力与 Lee-Tarver 模型和改进模型的仿真结果一致，在 830m/s 冲击速度下，最大冲击压力约为 0.06Mbar，在 0.5cm 监测点处，最大爆轰波压力约为 0.5Mbar，改进模型仿真结果与 Lee-Tarver 模型一致性较好，验证了改进模型的正确性。

最新录用，非最终出版稿

## 3. 优化模型的弹药安全性仿真应用

结合子弹/破片撞击安全性试验，应用优化模型进行子弹/破片撞击下的弹药安全性分析。对比子弹/破片撞击下弹药的响应状态，仿真与试验结果的一致性较好。

### 3.1. 子弹/破片撞击安全性试验方法

参考美军标 MIL-STD-2105D《美国非核弹药危险性评估试验标准》，开展子弹/破片撞击下的弹药安全性考核试验，试验布置如图 7 所示。弹药放置于托弹架，沿弹道在距离弹药壁面碰撞点 300mm 处布置测速靶。距弹心 5m 呈 120°分别布置 2 个超压传感器。距弹心 3m 呈 120°分别布置 1 块 2m×1.5m×5mm 的 Q235A 见证板。弹道枪距离弹药 17m，弹道炮距离弹药 12m。

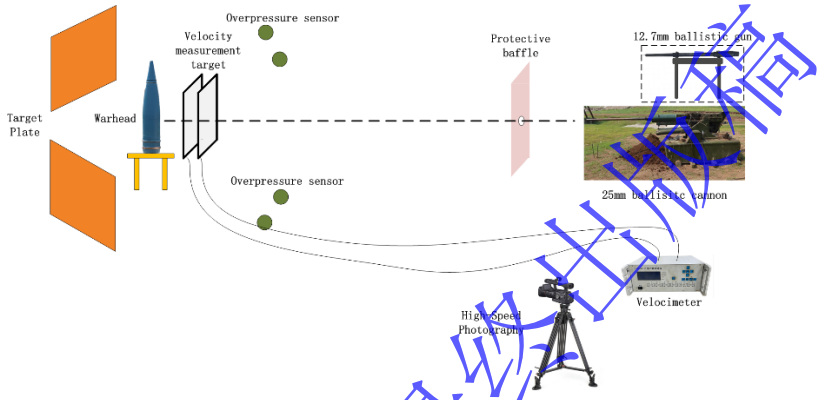



图 7 子弹/破片撞击试验示意图

Fig 7 Schematic diagram of bullet/fragment impact test

弹药装药为 RDX 基含铝炸药（RDX/Al/添加剂=80/19/1），装药质量约 4.5kg，弹药壳体材料为 30CrMnSi，弹壁厚 20mm。子弹/破片撞击试验装置包括弹道枪/弹道炮、枪架、防护板、见证板等，测试装置包括测速仪、测速靶、高速摄影和超压传感器。根据安全性试验标准，机械刺激源要求如表 5 所示。

表 5 机械刺激源要求

Table 5 Requirement of mechanical stimulus sources

| No. | stimulus source | driving method | impact velocity/(m/s) |
|---|---|---|---|
| 1 | 12.7mmbullet | ballistic gun | 850±20 |
| 2 | φ14.3mm cylindrical steel fragment | ballistic cannon | 1830±60 |

试验装置如图 8 所示。

(a)Ballistic gun

(b)12.7mm armour-piercing bullet

(c)Ballistic artillery

(d) Φ14.3mm cylindrical fragment

图 8 试验装置

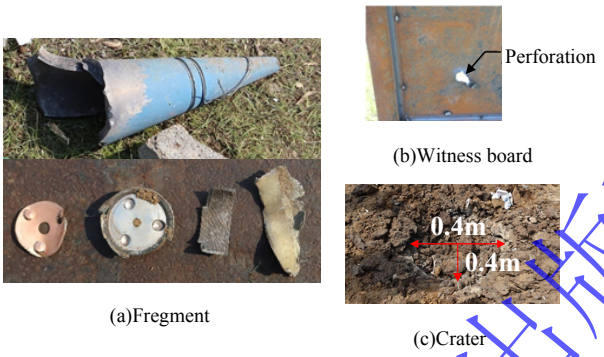
最新录用，非最终出版稿

Fig 8 Configuration of the experiment

### 3.2. 子弹/破片撞击安全性试验结果

依据美国 MIL-STD-2105D 弹药安全性评判方法，根据高速摄像机拍摄画面、见证板上弹孔数量、现场收集破片数量和反应声响判断弹药的响应等级。

子弹撞击试验结果如图 9 和图 10 所示。子弹撞击弹药的速度为 870m/s，观察高速摄影结果，子弹撞击弹药后产生了较强烈的火光和巨大的爆炸火球，壳体破裂形成了较大破片，弹药底部方向形成了约 φ0.4m×0.4m 的弹坑，见证板有穿孔。




(a)Fregment (b)Witness board (c)Crater

图 9 子弹撞击试验结果

Fig 9 Bullet impact experimental results

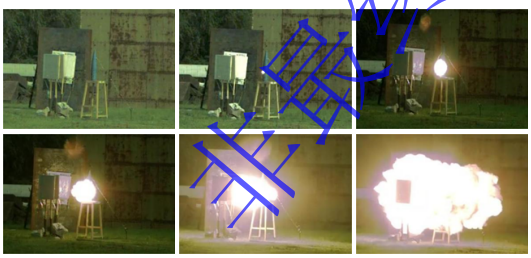


图 10 子弹撞击试验高速摄影结果

Fig 10 High speed camera recording images of bullet impact experiment

超压结果如表 6 所示。

表 6 超压测试结果

Table 6 Shock wave overpressure test results

| gauge point | peak overpressure/MPa | duration of positive pressure/ms |
|---|---|---|
| 1# | 0.065476 | 3.283 |
| 2# | 0.058072 | 3.103 |
| 3# | 0.067891 | 3.03 |
| 4# | 0.058015 | 3.173 |

对于刚性地面炸药爆轰条件下，5m 处的冲击波超压可根据经验公式计算：

$$\Delta P = \frac{0.1040}{\bar{R}} + \frac{0.4218}{\bar{R}^2} + \frac{1.3734}{\bar{R}^3} \tag{18}$$

其中，$\bar{R} = R/\sqrt[3]{m_w}$，$R$ 为距离爆心的距离，$m_w$ 为炸药 TNT 当量。

弹药装药质量为 4.5kg，炸药主要组分为 RDX，炸药 TNT 当量为：

最新录用，非最终出版稿

$$m_w = \frac{Q_{RDX}}{Q_{TNT}} \times m_{RDX} = 5.68kg \tag{19}$$

其中，$Q_{TNT}$ 为 TNT 爆热，$Q_{RDX}$ 为 RDX 爆热，$m_{RDX}$ 为装药质量。

通过式(18)计算出弹药爆轰条件下 5m 处的超压为 0.153MPa，测试超压为理想爆轰超压的 43.8%，再结合爆炸火球、试验残骸、见证板穿孔、底部弹坑等情况，参考 MIL-STD-2105D 响应等级评判方法，判断响应等级为爆炸反应。

破片撞击试验结果如图 11 和图 12 所示。破片撞击弹药的速度为 1885m/s，观察高速摄影结果，破片高速撞击导致局部区域温度迅速升高，高温热辐射产生明显亮光，随着破片动能被弹壁吸收以及温度的散失，侵彻结束。破片未穿透弹药壳体，在壁面形成了 φ33mm×12mm 的侵彻坑，由于冲击载荷远大于材料的动态屈服强度，侵彻过程金属材料类似流体状态，破片质量侵蚀明显。未检测到超压信号。弹药未响应。

图 11 破片撞击后壳体弹坑尺寸

Fig 11 Size of the shell crater after fragment impact

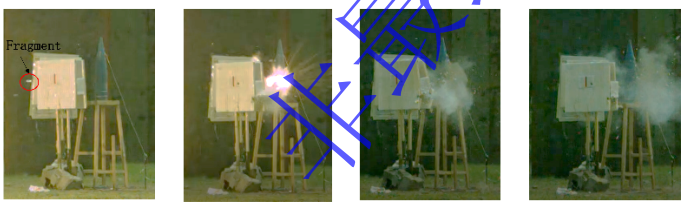



图 12 破片撞击试验高速摄影结果

Fig 12 High speed camera recording images of fragment impact experiment

### 3.3. 优化的点火增长模型参数标定

试验弹药装药为钝黑铝，参考文献[30]关于含铝炸药（80%RDX/20%Al）驱动金属板试验结果，标定新型点火增长模型的仿真参数。

基于文献[30]的含铝炸药驱动金属板试验装置结构，建立二维轴对称模型（图 13），简化结构中的炸药透镜部分。模型应用流固耦合算法进行数值模拟，炸药和空气均设置为流体，铜飞片与有机玻璃套设置为固体。

加载药柱 RDX/TNT 采用 JWL 状态方程，铜飞片材料模型采用*MAT_JOHNSON_COOK，参数[32]如表 7 所示，单位选择 cm-g-μs。

表 7 铜飞片材料 Johnson-Cook 本构模型的参数[32]

Table 7 Parameters of the Johnson-Cook Constitutive model for copper fragment material

| $\rho_0$ | $A$ | $B$ | $C$ | $n$ | $m$ | $T_m$ | $C_p$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 8.96 | 0.0009 | 0.00292 | 0.025 | 0.31 | 1.09 | 1356 | 3.83e-6 |

录用稿，非最终出版稿

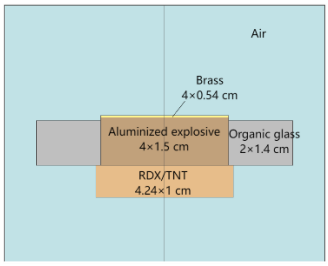



图 13 炸药驱动金属平板仿真模型

Fig 13 Simulation model of explosive-driven metal plate

以文献[33]含铝炸药 Lee-Tarver 点火增长模型状态方程参数为基础，应用 LS-OPT 中前馈神经网络空间采集的方法，对新型点火增长模型参数进行优化标定，并统计了新模型参数对计算结果的敏感程度，结果如图 14 所示。

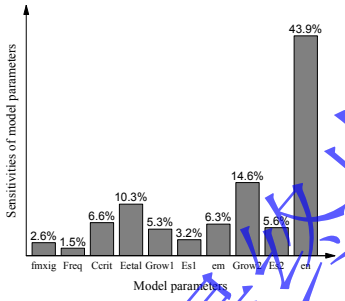



图 14 模型参数敏感度

Fig 14 Sensitivities of model parameters

参数敏感度统计结果显示，完成项对于仿真结果的整体影响最大，压力指数 *en* 的敏感度达到了 43.9%，比例系数 $Grow_2$ 达到 14.6%；增长项参量的敏感度相对平稳；点火项的压缩度指数 *Eetal* 敏感度达到 10.3%，参数敏感度分布为参数优化区间的选取提供参考，提高优化效率。在优化的反应速率模型中，参数 *Ccrit* 是临界压缩量，炸药压缩程度需满足阈值条件 $\eta_s \geq 1 + Ccrit$ 才能点火。对于大多数非均质炸药来说，与“热点”（球形空隙）的几何形状有关的指数参数基本保持不变。速率方程中参数 *Freq* 和 *Eetal* 控制冲击强度和持续时间函数的点火量，$Grow_1$、*en*、$Grow_2$ 和 *em* 控制反应增长速率。

LS-OPT 经过 201 次迭代运算后，参数优化结果如表 8 所示。

**表 8 LS-OPT 软件标定改进模型状态方程的参数结果**

Table 8 Parameter results of LS-OPT software calibration state equation of improved model

| *figmax* | *Freq* | *Ccrit* | *Eetal* | $Grow_1$ |
|---|---|---|---|---|
| 0.31 | 31300 | 0.042 | 8.49 | 570 |
| *Es1* | *em* | $Grow_2$ | *Es2* | *en* |
| 1.34 | 1.76 | 442 | 1.37 | 0.68 |

含铝炸药驱动金属板的试验[30]和仿真结果如图 15 所示。计算曲线和实验曲线整体趋势一致，平均误差低于 3%。

最新录用，非最终出版稿

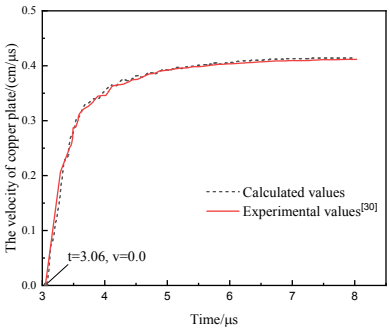
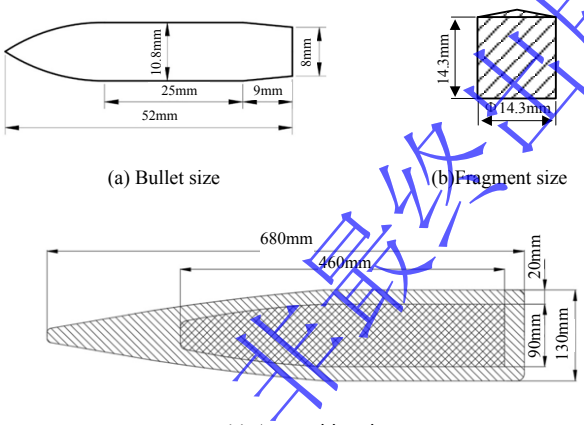



图 15 0.54mm 铜板自由面速度计算值与实验值

Fig 15 Calculated and experimental values of free surface velocity for 0.54mm copper plate

## 3.4. 数值仿真

应用优化的点火增长模型计算子弹/破片撞击弹药的冲击起爆过程，判断响应等级，模型尺寸如图 16 所示。




(a) Bullet size (b) Fragment size

(c) Ammunition size

图 16 仿真模型尺寸

Fig.16 Simulation model size

为分析子弹/破片撞击下炸药内部的压力和反应度，设置 5 个内部监测点，如图 17 所示。

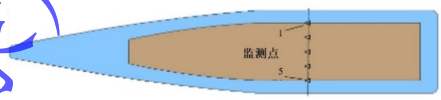
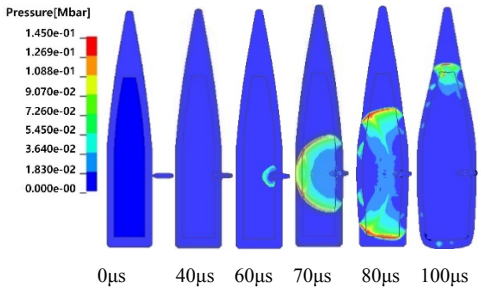



图 17 模型观测点分布

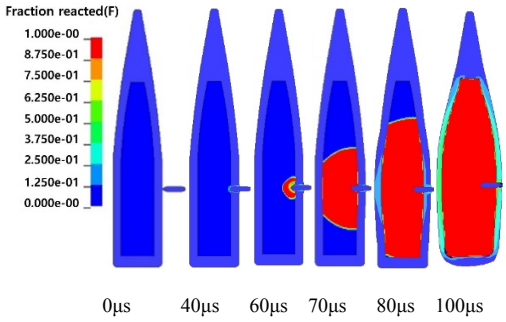
Fig 17 Distribution of model gauge points

子弹撞击弹药压力和反应度云图如图 18 所示。




(a) Pressure cloud map of bullet impact on ammunition at different times

最新录用，非最终出版稿




(b) Reaction fraction contour of bullet impact on ammunition at different times

图 18 子弹撞击弹药仿真结果

Fig 18 Simulation results of bullet impact on ammunition

子弹撞击某弹药不同时刻（t = 0μs、40μs、60μs、70μs、80μs、100μs）的压力和反应度云图显示，子弹撞击后弹药后 60μs，炸药局部开始形成热点，随后反应逐渐增长，直至 100μs 时炸药内部反应分数全达到 1，炸药完全反应。子弹撞击条件下，炸药内部压力变化如图 19 所示。

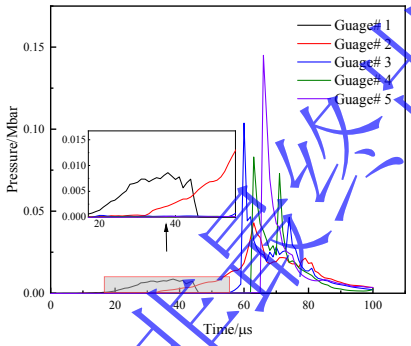



图 19 子弹撞击下的炸药内部压力

Fig 19 Internal pressure of explosive under bullet impact

子弹撞击弹药，冲击波传入的峰值压力为 0.008Mbar，伴随炸药的反应监测点 5 的压力最高，66μs 后峰值压力增至 0.145Mbar（14.5GPa），而 RDX 基炸药装药的爆压为 30GPa[30]，可知子弹撞击条件下炸药并未完全爆轰。

子弹撞击条件下的炸药反应度如图 20 所示。

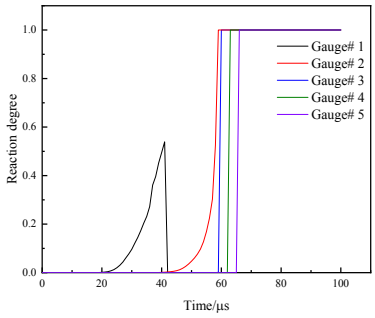



图 20 子弹撞击下的炸药反应度

Fig 20 The reaction degree of explosive under bullet impact

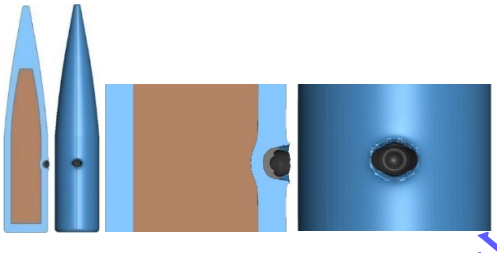
子弹撞击条件下，冲击波传入后监测点 1 处的最大反应度为 0.58，最大反应速率为 0.5μs$^{-1}$。点火导致压力激增，其余监测点处的反应度均快速达到 1。

破片撞击弹药压力和反应度云图如图 21 所示。

最新录用，非最终出版稿

10μs　　10μs

(a) Pressure contour of fragment impact on ammunition　　(b) Reaction fraction contour of fragment impact on ammunition



(c) Simulation results of the fragment impact on shell

图 21 破片撞击弹药仿真结果

Fig 21 Simulation results of fragment impact projectile

破片以 1885m/s 速度撞击弹药形成直径约 37.5mm 弹坑，弹坑尺寸基本与试验吻合。

破片撞击条件下的炸药内部压力变化如图 22 所示。

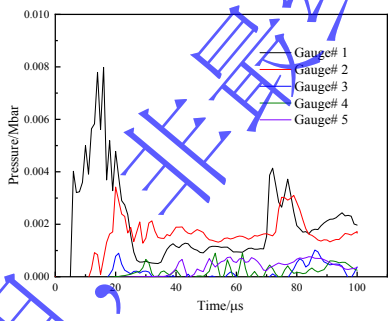



图 22 破片撞击下的炸药内部压力

Fig 22 Internal pressure of explosives under fragment impact

破片撞击条件下的炸药内部峰值压力为 0.0079Mbar，并快速衰减，破片撞击引起的冲击压力不足以起爆炸药。

破片撞击下的炸药反应度如图 23 所示。

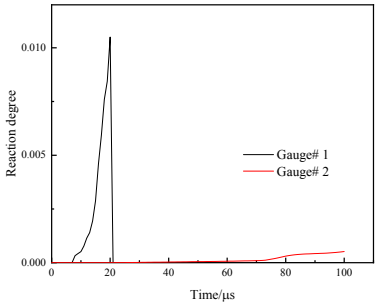



图 23 破片撞击下的炸药反应度

Fig 23 Reaction degree of explosive under fragment impact

破片撞击条件下，监测点 1 处的最大反应度为 0.01，其余监测点的炸药反应度几乎为 0，说明炸药未起爆，与试验结果一致。

最新录用，非最终出版稿

应用优化的点火增长模型，仿真计算了子弹和破片撞击下的冲击起爆特性，与试验结果一致性较好，结合炸药压力和反应速率为弹药响应等级的评判提供了仿真依据，验证了模型的工程应用性。

## 4. 结 论

针对 Lee-Tarver 模型参数多且相互关联的不足，引入半周期三角函数对三项速率方程进行优化，消除了点火项的反应度极限，改善速率方程的连续性；将增长项和完成项的形状因子最大数值限制为 1，有效控制了比例系数和形状因子的参数补偿效应，将模型参数降低至 10 个，降低了参数标定的难度，减少了参数标定的工作量，提高了参数标定效率。

基于 LS-Dyna 开发了优化的点火增长模型，对比了优化模型和 Lee-Tarver 模型的仿真结果，相同工况下炸药内部压力和反应度仿真结果高度一致，验证了优化模型的正确性。基于含铝炸药（80%RDX/20%Al）驱动金属板试验，应用 LS-OPT 中前馈神经网络空间采集的方法，标定了优化模型的参数，并量化分析了模型参数的敏感性，筛选出了影响速率方程的关键参数，为提高参数标定效率提供参考。对比炸药驱动金属板试验和仿真结果，仿真计算误差小于 3%，验证了标定参数的工程正确性。

应用优化的点火增长模型，对子弹/破片撞击下弹药的冲击起爆特性进行了仿真计算。子弹以 870m/s 速度撞击弹药，66μs 后峰值压力增至 0.145Mbar（14.5GPa），为炸药爆压（30GPa）的 48.3%，最大反应度为 0.58，最大反应速率为 0.5μs$^{-1}$；破片以 1885m/s 速度撞击弹药，弹药圆柱壁面形成约 φ37.5mm 的弹坑，炸药内部峰值压力为 0.0079Mbar，并快速衰减，炸药未起爆。优化的点火增长模型仿真结果与试验结果一致性较好，验证了模型的工程应用性。

**参考文献（References）**

[1]. Zhou T , Lou J , Zhang Y ,et al. Hot spot formation and chemical reaction initiation in shocked HMX crystals with nanovoids: a large-scale reactive molecular dynamics study[J].Physical Chemistry Chemical Physics, 2016, 18(26):17627-17645.

[2]. Sun J, Yang P, Wang Y, et al. Numerical study on detonation initiation by multiple hot spots[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2024, 40(1-4): 105191.

[3]. Liu W, Duan Z, Liu Y, et al. Numerical simulation of the damage and ignition responses of high explosives under low-velocity impact using the SPH method[J]. Engineering Analysis with Boundary Elements, 2024, 166: 105830.

[4]. 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.

[5]. Lee E L, Tarver C M. Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives[J]. Physics of Fluids, 1980, 23(12): 2362-2372.

[6]. Miao F, Li D, Cheng Y, et al. Shock initiation experiments with modeling on a DNAN based melt-cast insensitive explosive[J]. Defence Technology, 2024, 32: 655-662.

[7]. Yuan J , Duan Y , Han Y .Numerical simulation of multi-layer flyer impact initiation of a certain PBX explosive[J].Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 2024, 49(5): e202300252.

[8]. Bouyer V, Sheffield S A, Dattelbaum D M, et al. Experimental measurements of the chemical reaction zone of detonating liquid explosives[C]//AIP conference proceedings. American Institute of Physics, 2009, 1195(1): 177-180.

[9]. Bouyer V, Hebert P, Doucet M, et al. Experimental measurements of the chemical reaction zone of TATB and HMX based explosives[C]//AIP Conference Proceedings. American Institute of Physics, 2012, 1426(1): 209-212.

[10]. Loboiko B G , Lubyatinsky S N .Reaction Zones of Detonating Solid Explosives[J].Combustion Explosion & Shock Waves, 2000, 36(6):716-733.

最新录用，非最终出版稿

[11]. Yang Y, Duan Z P, Zhang L S, et al. Measurements of reaction zone and determination of the equation of state parameters of DNAN-based melt-cast aluminized explosive[J]. Journal of Energetic Materials, 2020, 38(2): 240-251.

[12]. 杨洋，段卓平，张连生，等. 两种 DNAN 基含铝炸药的爆轰性能[J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2019, 27(8): 679-684.

[13]. 李淑睿,段卓平,郑保辉,等.2,4-二硝基苯甲醚基熔铸含铝炸药圆筒试验及爆轰产物状态方程[J].兵工学报, 2021, 42(7):1424-1430.

[14]. Miao F , Li D , Cheng Y ,et al.Shock Initiation Experiments with Modeling on a DNAN Based MeltCast Insensitive Explosive[J].Defence Technology, 2024, 32(2):655-662.

[15]. 李淑睿,段卓平,郑保辉,等.2,4-二硝基苯甲醚基熔铸含铝炸药圆筒试验及爆轰产物状态方程[J].兵工学报, 2021, 42(7):1424-1430.

[16]. 王永亮.枪弹和破片对引信的打击及相关不敏感技术研究[D]. 南京：南京理工大学，2018: 20-22.

[17]. 路迎，王芳，卞晓兵，等. 破片对复合壳体装药冲击起爆判据的研究[J]. 兵工学报, 2017, 38(S1): 194-199.

[18]. Parepalli P, Nguyen Y T, Sen O, et al. Multi-scale modeling of shock initiation of a pressed energetic material III: Effect of Arrhenius chemical kinetic rates on macro-scale shock sensitivity[J]. Journal of Applied Physics, 2024, 135(8): 085106.

[19]. Jiang J, Xia Q Y, Xu S Y, et al. Evaluating shock sensitivity and decomposition of energetic materials by ReaxFF molecular dynamics[J]. Journal of Materials Science, 2024, 59(1): 114-129.

[20]. Liu R, Wu Y, Wang X, et al. Shock-induced energy localization and reaction growth considering chemical-inclusions effects for crystalline explosives[J]. Defence Technology, 2024, 33: 278-294.

[21]. 温丽晶，段卓平，张震宇，等.刚塑性黏结剂的双球壳塌缩热点反应模型[J].北京理工大学学报，2011，31(08)：883-887.

[22]. 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.

[23]. 李淑睿,段卓平,张震宇,等.含铝熔铸炸药冲击起爆数值模拟[J].兵工学报, 2020(S2):211-217.

[24]. 白志玲，段卓平，黄风雷.高聚物黏结炸药冲击起爆统计热点反应速率模型[J].兵工学报, 2021, 42(11):2379-2387.

[25]. Lu Y, Tan B, Li Y, et al. Numerical Simulation Study on Impact Initiation on Shielded Charge Using Hypervelocity Composite-Structure Reactive Fragments[J]. Polymers, 2024, 16(8): 1054.

[26]. 焦纲领,陈鹏万,刘睿,等.子弹撞击下 CL-20 基 PBX 装药响应研究[J].南京理工大学学报,2024,48(02):127-133.

[27]. 黎坤海.破片和枪弹对带壳装药的冲击起爆研究[D]. 南京：南京理工大学，2021: 23-25.

[28]. 金博.炸药冲击起爆唯象反应速率模型研究[D].中国工程物理研究院，2016: 60-65.

[29]. Cichocki M K, Sokoowski D. Numerical Analysis of Shock Initiation on Highly Energetic Material LX-04[J]. Problems of Mechatronics Armament Aviation Safety Engineering, 2020, 11(2):57-66.

[30]. 段继.含铝炸药爆轰驱动的非线性特征线模型[J].爆炸与冲击,2021,41(09):16-26.

[31]. Tarver C M. Ignition and growth reactive flow modeling of detonating LX-04 using recent and older experimental data[C]//AIP Conference Proceedings. AIP Publishing LLC, 2018, 1979(1): 100042.

[32]. Johnson G R, Cook W H. A constitutive model and data for metals subjected to large strains, high strain-rates and high temperatures [C]//Proceeding of 7th International Symposium on Ballistics, The Hague, The Netherlands, April 1983:541-547.

[33]. Lu J P, Lochert I J, Daniel M A, et al. Shock Sensitivity Studies for PBXN-109[J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 2016, 41(3): 562-571.

[34]. Liu Y, Wang H, Bai F, et al. A new equation of state for detonation products of rdx-based aluminized explosives[J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 2019, 44(10): 1293-1301.

录用稿，非最终出版稿

# Optimization Development and Application of Lee-Tarver Reaction Rate Model

DUAN Ji[1 *]，LI Jin[2]，ZHI Xiaokun[3]，ZHANG Shuxia[1]，YANG Xiao[1]，ZHOU Jie[1]

*(1. School of Mechanical and Electrical Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, Shanxi, China;*
*2. Chongqing Chang'an Wangjiang Industrial Group Co., Ltd, Chongqing 401120, Chongqing, China;*
*3. Jinxi Axle Company Limited, Taiyuan 030027, Shanxi, China)*

**Abstract:** To address the shortcomings of the Lee-Tarver ignition and growth reaction rate equation, which comprises numerous parameters (15) and is difficult to calibrate, semi-periodic trigonometric functions were introduced to optimize the model. The new rate equation enhances the continuity of the ignition term, restricts the maximum value of the shape factors for the growth and completion terms to 1, mitigates the parameter compensation between the proportional coefficients (Grow1 and Grow2) and the shape factors, eliminates the reaction degree limit of the trinomial structure, reduces the number of parameters in the reaction rate equation to 10, thereby improving parameter calibration efficiency. Based on LS-Dyna, a secondary development was conducted for the improved ignition and growth model. Comparative calculations were performed to assess the shock initiation simulation results from the Lee-Tarver model and the optimized model, revealing highly consistent results for the internal pressure and reaction degree of the explosive, validating the correctness of the model development. Utilizing experimental data from explosive-driven metal plates, the parameters of the optimized ignition and growth model were calibrated with LS-OPT, and the sensitivity of the rate equation parameters was statistically analyzed to identify key parameters, providing a reference for further improving parameter calibration efficiency. Comparisons between experimental and simulated results of explosive-driven metal plates showed a simulation error of less than 3%, confirming the engineering validity of the calibrated parameters. Applying the improved ignition and growth model with safety experiments, the impact initiation response characteristics of ammunitions under bullet/fragment impact were investigated. Within 66 μs after bullet impact, the peak internal pressure of the explosive reached 0.145 Mbar (48.3% of the detonation pressure), indicating no detonation reaction occurred. Under fragment impact conditions, the peak internal pressure of the explosive was only 0.0079 Mbar, with the reaction degree near the impact point being higher than in other regions, but the maximum reaction degree was merely 0.01, confirming no detonation. The simulation results of the optimized model exhibited good consistency with experimental test results, validating the engineering applicability of the optimized and developed ignition and growth model.

**Keywords:** ignition and growth model; parameter optimization; safety; secondary development; bullet/fragment impact

最新录用，非最终出版稿