PBX 炸药细观结构冲击点火的二维数值模拟

刘 群,陈 朗,伍俊英,王 晨

(北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室,北京 100081)

摘 要:为了研究冲击加载下非均质炸药的点火机理,对 PBX 炸药细观结构在冲击加载下的响应过程进行了二维 数值模拟。首先对炸药颗粒的压制过程进行数值模拟,获得 PBX 炸药的细观结构模型。然后对炸药冲击点火进 行数值模拟计算,考虑了热力耦合作用和炸药自热反应,分析了炸药颗粒尺寸、密度和黏结剂对炸药冲击点火的影响。结果表明,冲击作用下 PBX 炸药点火点出现在炸药颗粒与黏结剂界面处;炸药颗粒尺寸较小时,PBX 炸药点 火的临界压力较大;随着 PBX 炸药密度的增加,临界点火压力逐渐增大;黏结剂能够衰减冲击波对炸药颗粒的压 缩作用,黏结剂增多,PBX 炸药的临界点火压力提高。

关键词:爆炸力学;非均质炸药;细观结构;热点;冲击加载

中图分类号:TJ55 文献标志码:A 文章编号:1007-7812(2011)06-0010-07

Two-dimensional Mesoscale Simulation of Shock Ignition in PBX Explosives

LIU Qun, CHEN Lang, WU Jun-ying, WANG Chen

(State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute

of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract: To investigate the mechanism of shock ignition in heterogeneous explosives, two-dimensional mesoscale simulation of PBX explosives under shock loading was conducted. Through simulation of explosive particles pressing, the mesoscale structure of PBX was obtained. Then the shock ignition of PBX explosives was calculated, and the coupled thermo-mechanics and self-heating reaction were considered, and the influence of explosive density, particle size and binder content on shock ignition were analyzed. The results show that hot spots focus on the interface between explosive particles and binder. The critical pressure to ignite explosives in small particle size is higher than that in large particle size. The critical pressure to ignite explosives in low density is higher than that of explosives in high density. In addition, binders play an important role in attenuating shock intensity on explosive particles, and PBX explosives in more binder content are more insensitive than those in less binder content.

Key words: explosion mechanics; heterogeneous explosives; mesoscale structure; hot spots; shock loading

引 言

PBX 炸药主要由高能炸药、黏结剂和增塑剂等 按不同比例混合压制而成,组分的多样性造成炸药 细观结构的非均匀性^[1]。炸药的冲击点火对起爆过 程有重要影响。由于现有实验技术的限制,从实验 上直接测量炸药开始点火的临界状态十分困难。 采用解析计算方法难以考虑非均质炸药的复杂结 构对冲击点火的影响。数值模拟方法可以描述炸 药复杂细观结构,给出炸药内部不同组分界面之间 的相互作用,为分析不同情况下炸药冲击点火过程 提供了有效手段。

Mader 等^[2]通过在炸药内部建立规则排布的 空心圆球,描述非均质炸药细观结构,对冲击作用 下炸药的细观响应过程进行了三维数值模拟。 Conley 等^[3]利用图像处理技术,将炸药细观结构 扫描电镜照片转换成炸药细观结构计算模型,采 用二维欧拉程序计算了冲击作用下 PBX 炸药内部 温度场分布。Baer^[4]采用分子动力学的建模方法, 建立了炸药颗粒尺寸和位置随机分布的三维炸药 细观结构模型,分析了球形颗粒和立方体颗粒对

收稿日期:2011-07-13; 修回日期:2011-09-05 基金项目:国防 973(61383);国家自然科学基金 NSAF 重点基金(10832003) 作者简介:刘群(1983-),男,博士研究生,从事爆炸力学研究。

N.11.

炸药内部热点形成的影响。于继东等^[5]采用离散 元方法描述 PBX 炸药细观结构,计算了冲击作用 下炸药颗粒和黏结剂的细观响应过程。从现有研 究情况看,如何构建炸药细观结构模型是炸药冲 击点火过程计算的关键问题之一。虽然人们采用 多种方法建立炸药细观结构模型,但由于 PBX 炸 药结构非常复杂,现有模型与真实炸药结构还有 一定差距。

本研究采用非线性有限元计算方法,先对包裹 黏结剂的 HMX 颗粒的压药过程进行二维模拟计 算,获得 PBX 炸药细观结构模型,然后对飞片冲击 加载 PBX 炸药细观结构进行二维数值模拟计算,考 虑热力耦合作用和 PBX 炸药自热反应,计算其受力 和热响应,分析了颗粒尺寸、密度和黏结剂等因素 对 PBX 炸药冲击点火的影响。

1 PBX 炸药细观结构模型

图 1 是 PBX 炸药细观结构显微镜照片^[6]。照 片中炸药颗粒的等效直径为 0.1~0.9 mm, 黏结剂 厚度为 0.01~0.05 mm。从图 1 可以看出, 炸药颗 粒不规则排列,形状、大小各异, 黏结剂分布于炸药 颗粒之间。由于 PBX 炸药细观结构的复杂性, 直 接建立炸药细观结构的几何模型非常困难。考虑 到实际的 PBX 炸药是由炸药颗粒和黏结剂压制而 成, 如果将 PBX 炸药压制成型过程考虑到细观结 构构造中,可以得到较合理的 PBX 炸药细观结构 模型。



图 1 PBX **炸药细观结构显微镜照片** Fig. 1 SEM photograph of PBX explosives

本研究以一种高 HMX 含量 PBX 炸药为对象, 通过对包裹有黏结剂的 HMX 炸药颗粒压制过程进 行数值模拟计算,获得 PBX 炸药的细观结构模型。 假设未压前 HMX 炸药颗粒为圆形,且每个颗粒外 层都包裹一层黏结剂,所有颗粒的尺寸相同,HMX 颗粒与黏结剂的比例依据不同炸药成分确定,HMX 颗粒分层排列在刚性压药模具中,如图 2 所示。模 型中共有 100 个 HMX 颗粒,颗粒之间紧密接触。 HMX 颗粒的直径为 0.4~0.8mm,外层包裹的黏 结剂为 Estane,厚度为 0.015~0.025mm,HMX 的 质量分数为 85%~95%。图 3 是 HMX 颗粒和黏 结剂的局部网格图。



图 2 规则排列炸药颗粒





图 3 HMX 颗粒和黏结剂网格

Fig. 3 Mesh of HMX particle and binder

采用非线性有限元计算方法,对 HMX 炸药颗 粒压制过程进行二维数值模拟^[7],计算中 HMX 炸 药上部为冲头加压面,其他三个方向为刚性壁面 约束。通过冲头对置于模具中的 HMX 炸药颗粒 进行加压,冲头以一定速度向下移动,外层包有黏 结剂的 HMX 炸药颗粒在冲头的挤压作用下发生 变形,冲头移动到设定位置时停止,HMX 炸药颗 粒被压制成一定形状,得到 PBX 炸药细观结构 模型。

图 4 是密度为 1.90 g/cm³ 的 PBX 炸药细观结 构图。从图 4 可以看出,整个 PBX 炸药呈密实状 态,HMX 颗粒和黏结剂紧密接触。初始状态为圆 形的 HMX 炸药颗粒发生变形,各个颗粒的形状有 一定差异。初始尺寸相同的 HMX 颗粒在压制过程 中受到各个方向的挤压,尺寸大小也发生一定变 化。HMX 颗粒在相互挤压过程中发生侧向位移, 黏结剂填充在 HMX 颗粒之间,颗粒和黏结剂的分 布呈现不规则性。以上结构特征与图 1 中的 PBX 炸药细观结构相似。通过改变压药计算条件,可以 获得不同装药密度、颗粒尺寸和黏结剂质量分数的 PBX 炸药细观结构。



图 4 PBX 炸药细观结构模型

Fig. 4 Mesoscale model of PBX

2 PBX 炸药冲击点火数值模拟

2.1 计算模型

采用非线性有限元计算方法^[8],对 PBX 炸药细 观结构冲击点火过程进行二维数值模拟计算。计 算模型如图 5 所示。模型由飞片、隔板和 PBX 炸药 组成。计算中,飞片以一定速度撞击隔板,产生的 冲击波经隔板衰减后作用于 PBX 炸药,观察炸药颗 粒和黏结剂的动态响应。计算模型中 PBX 炸药高 为 6.4 mm, 宽为 8.4 mm, 飞片和隔板厚度均为 1mm, 宽为 8.4mm。



图 5 冲击加载 PBX 炸药计算模型

Fig. 5 Calculating model of PBX under shock loading

2.2 材料模型

模型中 HMX 颗粒和 Estane 黏结剂都采用弹 塑性流体力学材料模型和格林爱森状态方程描述。 飞片和隔板材料为钢,采用塑性动力学模型描述。 采用各向同性热材料模型来描述 HMX 颗粒和黏结 剂的温度变化,实现热和力的耦合分析。根据能量 守恒原理,热问题的基本有限元方程可由热平衡方 程推导求得[8]:

$$[C]\{ \stackrel{\bullet}{T} \} + [K_T]\{T\} = \{Q\}$$
(1)

式中:[C]为比热矩阵,考虑系统内能的增加; $[K_T]$ 为热传导矩阵,包括导热系数、对流系数及辐射率 和形状系数; $\{T\}$ 为节点温度向量; $\{\overset{\bullet}{T}\}$ 为温度对时 间的导数:{Q}为节点热流率向量。

热力耦合计算的基本方程为:

$\begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} K \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 \\ - \begin{bmatrix} 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} K_T \end{bmatrix} \left\{ \begin{cases} u \\ T \end{cases} \right\} = \left\{ \end{bmatrix}$	$\left. \left. \left\{ F \right\} \atop \left\{ Q \right\} ight brace$
		(2)

式中:</u>
出一、 加的节点力和由热应变引起的力。除了 HMX 受力 发生形变引起温升外,HMX 自热反应放出的热量 会引起温度的升高,最终引起炸药点火。采用 Arrhenius 方程描述 HMX 自热反应^[9]:

$$S = \rho Q Z \exp(-\frac{E}{RT}) \tag{3}$$

式中:S为源项;o为炸药密度;Q为反应热;Z为指前 因子;E为活化能;R为普适气体常数;T为温度。计 算中 HMX 反应热为 2100 J/g, 指前因子为 5×1019 s⁻¹,活化能为 221. 34 J/mol^[10]。整个模型的初始温 度设为 298 K。表 1 是模型中的主要材料参数^[10-12]。

表 1	主要材	料参数
Table 1	Material	parameters

材料	$ ho_0/(g \cdot cm^{-3})$	G_0/GPa	σ_0/GPa	$c/(\mathrm{km} \cdot \mathrm{s}^{-1})$	5	γ_0	$\lambda/(W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1})$	$C/(\mathbf{J} \cdot \mathbf{kg}^{-1} \cdot \mathbf{K}^{-1})$
HMX	1.900	2.700	0.10	2.901	2.06	1.100	0.370	1 100
Estane	1.100	0.270	0.01	2.350	1.70	1.000	0.226	1 1 5 5
钢	7.850	79.00	1.850	4.570	1.49	1.930	50	445

注:ρ₀ 为密度;G₀ 为剪切模量;σ₀ 为屈服应力;c 为声速;λ 为导热系数;C 为比热。

2.3 计算结果与分析

2.3.1 细观结构对炸药温度场和压力场的影响

采用速度为 1.0 km/s 的飞片冲击加载 PBX 炸 药,2.05μs时PBX炸药内部压力分布见图6。可以 看出,冲击波经过的两层 HMX 颗粒,黏结剂周围的 压力较高,这是由于黏结剂屈服强度较低,冲击作 用下 HMX 颗粒更易于向黏结剂方向移动,挤压黏 结剂,形成局部高压区。2.35 µs 时 PBX 炸药内部 温度分布图见图 7。可以看出,此时冲击波传播至 第五层 HMX 颗粒, PBX 炸药内部温度场分布不规 则,高温区主要分布在黏结剂附近,这是由于冲击 作用下黏结剂发生大变形,引起较大温升,同时黏 结剂将热量传递给 HMX 颗粒,与黏结剂接触的颗 粒出现局部高温区。



第34卷第6期

图 6 2.05 µs 时 PBX 炸药内部压力分布

Fig. 6 Pressure distribution of PBX at 2.05 μs



图 7 2.35 µs 时 PBX 炸药内部温度分布

Fig. 7 Temperature distribution of PBX at 2. $35 \,\mu s$

在 HMX 颗粒与黏结剂界面处取两个监测点, 如图 8 所示,其中 1 号点距离冲击波入射面 1.7 mm,2 号点距离冲击波入射面 2.3 mm,分析细 观结构对 PBX 炸药内部压力变化的影响,监测点处 压力变化历程见图 9。可以看出,虽然冲击波是经 过1号监测点后传播到2号监测点,但是1号监测 点的峰值压力低于2号监测点,表明冲击波没有衰 减,反而增强。这可能是由于1号监测点处冲击波 由 HMX 颗粒传入黏结剂,即由高阻抗材料传播到 低阻抗材料,界面处压力降低;2号监测点处冲击波 由黏结剂传入 HMX 颗粒,即由低阻抗材料传播到 高阻抗材料,界面处压力升高,最终导致1号监测点 处压力低于2号监测点。此外,在峰值压力过后两 个监测点处压力都出现震荡,这也是由于后续冲击 波经过 PBX 炸药细观结构的各个界面出现压力波 动引起的。



图 8 PBX 炸药内部压力监测点

Fig. 8 Pressure monitors in PBX

在 PBX 炸药内部取 4 个监测点观察温度变化 历程,如图 10 所示,其中 1 号点位于黏结剂,2 号,3





号和 4 号点位于 HMX 颗粒,HMX 颗粒距离入射 冲击波界面 1.3 mm。监测点处温度变化历程见图 11。可以看出,冲击压缩下,1 号点峰值温度达到 1200 K,2 号、3 号和 4 号点峰值温度只有 600 K 左 右,这表明黏结剂的温升要明显高于 HMX 颗粒,这 是由于黏结剂屈服强度较低,在冲击作用下容易发 生黏塑性流动引起很大的温升。



图 10 PBX **炸药内部温度监测点** Fig. 10 Temperature monitors in PBX



图 11 监测点处温度变化历程

Fig. 11 Temperatune history at monitors

比较 HMX 颗粒中的三个监测点可以看出, HMX 颗粒外层的温度稍高于颗粒中心,表明 HMX 颗粒外层的温升更快,这可能由两方面原因 造成,一方面由于温度较高的黏结剂将热量传递 给周围颗粒,另一方面由于 HMX 颗粒外层压缩黏 结剂发生塑性流动引起局部温升。由于 HMX 会 发生自热反应,当 HMX 颗粒外层温升达到一定程 度时,化学反应放出的热量引起 HMX 快速反应, 在 HMX 颗粒外层某位置处温度出现突越上升, PBX 炸药发生点火。PBX 炸药内部点火点的位置 见图 12。可以看出,点火点位于 HMX 颗粒和黏 结剂的界面处。点火点处温度变化曲线见图 13。 从图 13 可知,炸药在冲击压缩以及自热反应作用 下,温度不断上升,当温度达到 1100 K 时,温度发 生突越上升,PBX 炸药发生点火,因此炸药发生点 火的最小入射冲击波压力就是炸药的临界点火 压力。









2.3.2 颗粒尺寸对 PBX 炸药冲击点火的影响

对3种颗粒尺寸 PBX 炸药的冲击点火进行了 数值模拟计算。400、600 和 800 µm 炸药点火时入 射冲击波压力一时间曲线见图 14。图 14 给出了炸 药发生点火的位置,3 种颗粒尺寸炸药发生点火的 位置有很大区别,但都分布在 HMX 颗粒和黏结剂 的界面上。随着 HMX 颗粒尺寸的减小,PBX 炸药 的临界点火压力逐渐增大,这是由于尺寸较小的 HMX 颗粒之间的黏结剂分布较均匀,在冲击作用 下能够更好地衰减前导冲击波对 HMX 颗粒的冲击 压缩作用,HMX 颗粒难以达到较高的温度,因此 HMX 颗粒尺寸较小的 PBX 炸药难以点火,这与 Moulard 的研究结果一致^[13]。



图 14 三种颗粒尺寸 PBX 炸药发生点火时 入射冲击波压力一时间曲线

Fig. 14 Input pressure histories of explosive at different particle size in the case of shock ignition

2.3.3 密度对 PBX 炸药冲击点火的影响

分别计算了密度为 1.72、1.80、1.86 和 1.90 g/ cm³ PBX 炸药的冲击点火过程。图 15 是 4 种密度 PBX 炸药内部点火点位置。可以看出,PBX 炸药密 度为 1.72、1.80 和 1.86 g/cm³ 时,炸药点火点主要 分布在孔隙周围,这是由于这些低密度 PBX 炸药内 部仍然含有部分孔隙,孔隙在冲击作用下会发生塌 陷,孔隙周围的 HMX 颗粒发生相互碰撞,颗粒自由 面的动能转化为内能,引起炸药较大的温升,发生 点火。密度为 1.90 g/cm³ 的 PBX 炸药点火点分布 在 HMX 颗粒和黏结剂的界面处,这是由于该密度 下 PBX 炸药基本处于密实状态,HMX 颗粒之间没 有孔隙,PBX 炸药点火主要是由于颗粒挤压黏结剂 发生黏塑性流动引起,点火位置出现在高温黏结剂 与 HMX 颗粒的接触界面上。



with different densities

图 16 是不同密度 PBX 炸药的临界点火压力变 化趋势图。可以看出,随着密度的增加,PBX 炸药 的临界点火压力逐渐增大,并且增大的程度更加明 显。这是由于低密度 PBX 炸药发生点火的机制主 要是孔隙塌陷,孔隙的会聚作用使 PBX 炸药在较低 的压力下就能发生点火;随着 PBX 炸药密度的增 加,炸药内部孔隙逐渐减少,PBX 炸药发生点火的 机制主要是冲击作用下 HMX 颗粒粘塑性流动,这 种流动引起的温升小于孔隙塌陷引起的温升,炸药 的临界点火压力提高。因此,随着 PBX 炸药密度的 升高,炸药细观结构差别导致发生点火的主导机制 发生变化,引起 PBX 炸药的临界点火压力逐渐 提高。

2.3.4 黏结剂含量对 PBX 炸药冲击点火的影响

研究了黏结剂含量对炸药温度场分布的影响, PBX 炸药的黏结剂质量分数分别为 5%、10% 和 15%。3种 PBX 炸药的压药密度均为 1.90g/cm³。 采用速度为 1.1 km/s 的飞片撞击 3 种 PBX 炸药, 图 17 是 3 种黏结剂含量的 PBX 炸药温度分布。此时冲击波传播到第三层 HMX 颗粒,可以看出,当黏结剂质量分数为 5%时,PBX 炸药中温度高于 650 K的高温区面积较大;当黏结剂质量分数为 10%时,PBX 炸药中高温区温度在 540~620 K;当黏结剂质量分数为 15%时,PBX 炸药中高温区温度基本低于 540 K,即在相同的冲击加载情况下,PBX 炸药内部 温度随着黏结剂的增多而降低,这表明黏结剂的增 加能够降低冲击作用下 PBX 炸药内部的温升,使炸药难以点火。



116 不同压装密度 PBX 炸药的临界点火压力 Fig. 16 Critical pressure of shock ignition of explosives with different densities



(a)w(黏结剂)=5%(b)w(黏结剂)=10%(c)w(黏结剂)=15%

图 17 3 种黏结剂质量分数 PBX 炸药温度分布

Fig. 17 Temperature distribution of

PBX explosives with different binder content

在距离 PBX 炸药上表面 2 mm 处设置监测点, 监测点位于 HMX 颗粒内部,如图 18 所示,记录监 测点处压力变化历程,研究黏结剂质量分数对冲 击波传播的影响。图 19 是 3 种炸药在监测点处 的压力历程曲线,可以看出,随着黏结剂质量分数 的提高,监测点处的峰值压力逐渐减小,冲击波传 播到监测点的时间逐渐增加,冲击波传播速度逐 渐降低,这表明黏结剂增多对冲击波有更好的衰 减作用,冲击波对 HMX 颗粒的冲击压缩作用降 低,因此在 HMX 颗粒与黏结剂界面处都难以产 生局部高温区,形成热点。3 种黏结剂质量分数 炸药的临界点火压力分别为 7.7、8.4、9.0 GPa。 随着 PBX 炸药中黏结剂的增多,PBX 炸药的临

界点火压力逐渐提高,PBX 炸药的冲击感度逐渐 降低。



图 18 压力监测点位置 Fig. 18 Pressure monitor site



3 种炸药监测点处压力历程曲线 图 19 Fig. 19 Pressure histories of monitor in different explosives

3 结 论

(1)通过炸药颗粒压制过程的数值模拟建立了 PBX 炸药细观结构模型,获得的细观结构能够反映 炸药颗粒形状、位置和黏结剂分布的特征,与真实 PBX 炸药细观结构有一定的相似性。

(2)PBX 炸药点火点主要分布在炸药颗粒和黏 结剂的界面上;颗粒尺寸较小时,PBX 炸药的临界 点火压力较大;随着密度的增加,PBX 炸药发生点 火的主导机制发生变化,导致 PBX 炸药的临界点火 压力逐渐提高;黏结剂对冲击波具有较好的衰减作 用,随着黏结剂的增多,PBX 炸药的临界点火压力 升高。

(3)本工作仅是对 PBX 炸药冲击点火过程的二 维数值模拟,下一步工作是建立 PBX 炸药细观结构 的三维计算模型,使计算模型与实际炸药结构更接 近,考虑炸药颗粒尺寸的随机分布,对炸药冲击点 火过程进行三维数值模拟计算。

参考文献:

- [1] 孙锦山,朱建士.理论爆轰物理[M].北京:国防工业出 版社,1995.
- $\lceil 2 \rceil$ Mader C L, Kershner J D. The heterogeneous explosive reaction zone [C]//9th International Symposium of Detonation. Oregon: [s. n.], 1989.
- [3] Conley P A, Benson D J. Microstructural effects in shock initiation[C]//11th International Symposium of Detonation. Snowmass:[s. n.],1998.
- [4] Baer M R. Modeling heterogeneous energetic materials at the mesoscale [J]. Thermochimica acta, 2002, 384: 351-367.
- [5] 于继东,王文强,刘仓理,等.炸药冲击响应的二维细观 离散元模拟[J].爆炸与冲击,2008,28(6):488-493. YU Ji-dong, WANG Wen-qiang, LIU Cang-li, et al. Two-dimensional mesoscale discrete element simulation of shock response of explosives [J]. Explosion and Shock Waves, 2008,28(6):488-493.
- [6] 王沛. 高能炸药烤燃实验和数值模拟计算[D]. 北京: 北京理工大学,2009.

WANG Pei. Cook-off experiment and numerical simulation for explosives [D]. Beijing: Beijing Institute of

刘群,陈朗,鲁建英,等.炸药颗粒压制成型数值模拟

ves 以群、陈朗,鲁建英,等.炸药颗粒压制成 LIU Qun,CHEN Lang,LU Jian-win simulation of even LIU Qun, CHEN Lang, LU Jian-ying, et al. Numerical simulation of explosive Particle compaction [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2009, 23 (6): 421-426.

- [8] Hallquist J O. LS-DYNA user's manual (Nonlinear dynamic analysis of structures in three dimensions)[M]. California: University of California, 2001.
- [9] 楚士晋. 炸药热分析[M]. 北京:科学出版社,1994.
- [10] Tarver C M, Tran T D. Thermal decomposition models for HMX-based plastic bonded explosives [J]. Combustion and Flame, 2004, 137: 50-62.
- [11] Baer M R, Kipp M E, Swol F V. Micromechanical modeling of heterogeneous energetic materials [C]//11th International Symposium of Detonation. Snowmass:[s. n. 7,1998.
- [12] Burnham A K, Weese R K. Kinetics of thermal degradation of explosive binders Viton A, Estane, and Kel-F [J]. Thermochimica acta, 2005, 426:85-92.
- [13] Moulard H. Particular aspects of the explosive particle size effect on shock sensitivity of PBX formulations [C]//9th International Symposium of Detonation. Oregon:[s. n.],1989.