

# 冲击作用下凝聚态含能材料 热点形成热-机械分析

张泰华 赵壮华 范时俊

(西安近代化学研究所 西安 710061)

**摘要** 应用动力有限元方法分析含能材料中热点形成机理。在假定凝聚态含能材料为可压缩的情况下,研究圆形和椭圆形微孔洞附近介质在冲击作用下热-机械响应过程,结果显示冲击波强度、空隙率、微孔洞尺寸和形状、熔点对热点温升有强烈影响,并讨论粘塑性功和固相压缩成为主要机制的条件。

**关键词** 含能材料 热点 粘塑性 固相压缩

**中图分类号** O347.4

## 1 引言

随着现代高性能武器系统的飞速发展,对提高含能材料装药在各种条件下安全性和可靠性的要求日益迫切。众所周知,含能材料受到冲击载荷作用时,在局部形成热点,可能导致意外燃烧和爆炸。目前已提出多种热点形成机理,但文献[1~2]认为形成热点最可能的机理是粘塑性微孔洞塌缩。近十多年来研究这种机理的文献较多<sup>[1~5]</sup>,虽然侧重点不同,但所用的基本假设和计算方法是相同的。模型基本假设为:(1)在微孔洞附近的流场是球对称的;(2)凝聚态含能材料是不可压缩的;(3)固体材料的本构关系选用粘理想刚塑性模型。尽管对这种作用机理已有不少认识,但还存在以下几个仍需讨论和分析的问题。(1)含能材料为多孔介质,实际上是可压缩的。文献把含能材料处理成不可压缩材料,固相压缩无法考虑。文献[1]认为冲击压力不能太高,应限制在1 GPa以下,否则材料的可压缩性开始影响计算结果。(2)材料在强冲击作用下呈弹塑性流体行为,本构关系应考虑应变率效应、热软化和压力效应等因素的影响,而文献中所使用的本构关系是粘理想刚塑性模型。(3)文献是从一维球对称假设出发的,只能计算球形胞元,所处理的问题过于简单。

含能材料的燃烧和爆炸涉及物理、化学以及弹塑性流体动力学等问题,对这样一个复杂问题,只能分门别类、分阶段地进行研究。我们采用动力有限元方法研究含能材料在冲击波作用下单个微孔洞附近介质变形和温升的时空分布。由于对含能材料在冲击作用下热力学特性认识的局限性以及理论分析和数值计算模型的简化等原因,所以得到的是总的趋势而不是某一特定引发阈值<sup>[1]</sup>。我们将对熔点相差较大的 TNT, RDX 从冲击波强度、空隙率、微孔洞(半径小于1mm)几何尺寸和形状等方面研究对其热点温升的影响。

## 2 计算中基本方程

我们采用的二维轴对称动力有限元程序假定含能材料为可压缩的均匀各向同性粘弹塑性材料,本构关系为流体弹塑性体模型,该模型的核心内容是

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + s_{ij} \quad (1)$$

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\epsilon}_v\delta_{ij} + \dot{e}_{ij} \quad (2)$$

在柱坐标系中

$$p = -(\sigma_r + \sigma_z + \sigma_\theta)/3 \quad (3)$$

$$\dot{\epsilon}_v = (\dot{\epsilon}_r + \dot{\epsilon}_z + \dot{\epsilon}_\theta)/3 = \dot{V}/3V \quad (4)$$

式中: $\sigma_{ij}$ ,  $\dot{\epsilon}_{ij}$ 为应力、应变率分量, $p$ ,  $s_{ij}$ 分别为静水压、应力偏量, $\dot{\epsilon}_v$ ,  $\dot{e}_{ij}$ 分别为体应变率、应变率偏量。

引入人工粘性项以便在计算中有效地消除振荡

$$\begin{cases} q = c_L \rho_0 c_s h_{\min} |\dot{\epsilon}_v| + c_0^2 \rho_0 h_{\min}^2 \dot{\epsilon}_v^2 & \dot{\epsilon}_v < 0 \\ q = 0 & \dot{\epsilon}_v \geq 0 \end{cases} \quad (5)$$

式中: $q$ 为人工粘性项, $c_s$ 为声速, $h_{\min}$ 为三角形单元的最小高, $c_L$ 和 $c_0$ 为经验常数。

静水压力 $p$ 由 Mie-Grüneisen 状态方程确定

$$p = (K_1\mu + K_2\mu^2 + K_3\mu^3)(1 - 0.5\Gamma\mu) + \Gamma E_s(1 + \mu) \quad (6)$$

式中: $K_1, K_2, K_3$ 为材料常数,它们通常由实测 Hugoniot 数据确定, $\Gamma$ 为材料的 Mie-Grüneisen 系数, $\mu = \rho/\rho_0 - 1$ ,与体积变形有关( $\rho, \rho_0$ 为当前、初始材料密度), $E_s$ 为比内能。

应力偏量和应变偏量间有增量型的弹性本构关系。数值计算中通常采用下述弹性尝试计算实现

$$\dot{s}_{ij} = 2G\dot{e}_{ij} + \omega_{ik}s_{kj} + \omega_{jk}s_{ki} \quad (7)$$

式中: $G$ 为剪切模量, $\omega_{ik}, \omega_{jk}$ 为旋转率,后两项用于计算中的旋转修正。如果材料进入塑性屈服,用 Mises 屈服准则描述并必须对其进行修正。

热点的瞬态响应主要表现为波动效应,时间尺度常以纳秒为单位,因此热传导的作用可忽略不计,设体系无外热源作用,则能量方程可写成

$$dE_s = -(p + q)\dot{\epsilon}_v dt + dE_d \quad (8)$$

式中: $E_d$ 为偏应力和剪应力所做的功, $q$ 为人工粘性。

这时可认为单元内能的增加导致温度上升,温度由下式求得

$$T = T_0 + E_s/c\rho_0 \quad (9)$$

式中: $T$ 为单元温度, $T_0$ 为单元初始温度, $c$ 为材料比热。

有关积分方法,采用中心差分格式。关于时间步长 $\Delta t$ 由 Courant 稳定性给出

$$\Delta t = c_i h_{\min} / (\sqrt{g^2} + \sqrt{g^2 + c_i^2}) \quad (10)$$

式中: $g^2 = c_0^2 q/\rho$ 为人工粘性的影响, $c_i$ 为小于 1 的稳定性系数。

### 3 计算模型、假设和参数选取

#### 3.1 计算模型、假设

数值模拟是以 Carroll 和 Holt<sup>[6]</sup>提出的单个球形胞元模型为基础。在冲击波作用下可把含能材料看作由微孔洞和基体组成的集合体,再从中取出一个“单元”体——胞元,胞元就可作为集合体属性的统计代表。如不考虑胞元之间相互作用,就可根据胞元行为来研究整个多孔介质的行为。在不影响问题物理本质的条件下,为了简化分析,作如下假设。

(1)在微孔洞附近的流场是轴对称的,胞元外表面为球,内表面为球或椭球;冲击波经过胞元的时间远远小于塌缩时间<sup>[1,4]</sup>,冲击压力可认为是瞬间被加上的,胞元塌缩是轴对称的。

(2)含能材料在强动载作用过程中可不考虑热传导的影响。文献[1]经过计算显示,空隙尺寸在1~1000 $\mu\text{m}$ 范围内对粘塑性微孔洞塌缩模型来说,热传导几乎不影响胞元的温度分布。

(3)凝聚相中没有化学分解。

#### 3.2 参数选取

由于对称性,仅考虑1/4胞元扇面。计算选取圆内孔半径为4,12,50 $\mu\text{m}$ ,同时为便于研究内孔形状对胞元温升的影响,与圆内孔半径为12,50 $\mu\text{m}$ 胞元对应的椭圆长短轴分别为6,24 $\mu\text{m}$ 和25,100 $\mu\text{m}$ ,这样便保证空隙率的一致。胞元的外半径由含能材料的空隙率而定,空隙率为0.02,0.03,0.04。胞元外边界以恒定压力 $p$ 近似冲击加载过程,压力幅值为0.5,1,3,5,10GPa。

冲击过程中材料熔点温度随压力变化,取熔点温度 $T_m(p)$ 的函数形式如下

$$T_m(p) = T_{m0} + \beta p \quad (11)$$

式中: $T_{m0}$ 为常压下熔点温度,与熔点相关的实验参数 $\beta = 2.0 \times 10^{-7} \text{K/Pa}$ 。

由于需要考虑熔化效应,TNT炸药粘性系数和屈服强度的函数形式如下<sup>[1]</sup>

$$\begin{cases} \mu(p, T) = \mu_0 & T < T_m \\ \mu(p, T) = \mu_0 \exp(p/p_A) \exp(E/T - E/T_m) & T > T_m \end{cases} \quad (12 \cdot 1)$$

$$\begin{cases} Y(p, T) = Y_0 & T < T_m - 30 \\ Y(p, T) = Y_0(T_m - T)/30 & T_m - 30 < T < T_m \\ Y(p, T) = 0 & T > T_m \end{cases} \quad (12 \cdot 2)$$

式中:与粘度相关的实验参数 $p_A = 0.165 \text{GPa}$ , $E = 3880.0 \text{K}$ 。

RDX炸药粘性系数和屈服强度的函数形式如下<sup>[3,4]</sup>

$$\begin{cases} \mu(p, T) = \mu_0 \exp(\eta p T_0/T) & T < T_m \\ \mu(p, T) = \mu_0 \exp(\eta p T_0/T) \exp[E_c/R(1/T - 1/T_m)] & T > T_m \end{cases} \quad (13 \cdot 1)$$

$$\begin{cases} Y(p, T) = Y_0(T_m - T)/(T_m - T_0) & T < T_m \\ Y(p, T) = 0 & T > T_m \end{cases} \quad (13 \cdot 2)$$

式中:与粘度相关的实验参数 $\eta = 0.10 \text{GPa}^{-1}$ , $E_c = 1.93 \text{MJ/mol}$ , $R$ 为普适气体常数。计算中的炸药参数见表1。

表1 TNT,RDX 炸药的计算参数<sup>[1~5]</sup>

Table 1 Parameters for TNT, RDX in calculations

计算参数	TNT	RDX
密度 $\rho$ /(kg/m <sup>3</sup> )	1650.0	1806.0
比热 $c$ /(J/kg·K)	1290.0	1465.0
常压、室温下粘度 $\mu_0$ /(kg/s·m)	100.0	50.0
初始温度 $T_0$ /K	300.0	300.0
常压下熔点温度 $T_{m0}$ /K	355.0	558.0
屈服强度 $Y_0$ /GPa	0.05	0.11
剪切模量 $G_0$ /GPa	1.1	1.6
与状态方程相关的实验参数		
$\Gamma$	0.737	1.29
$K_1$ /GPa	9.219	13.90
$K_2$ /GPa	36.88	38.93
$K_3$ /GPa	89.89	58.80

#### 4 计算结果与讨论

本文计算工作是在微机中 NDP FORTRAN-386 下进行的,计算结果是经图形工具软件 GT 处理的。图中 A、B、C 分别为 45° 半径方向胞元内、中、外三点。

##### 4.1 冲击波强度对热点温升的影响

胞元温升强烈地依赖于冲击波强度。从图 1 可看出在几何尺寸相同的情况下 10GPa

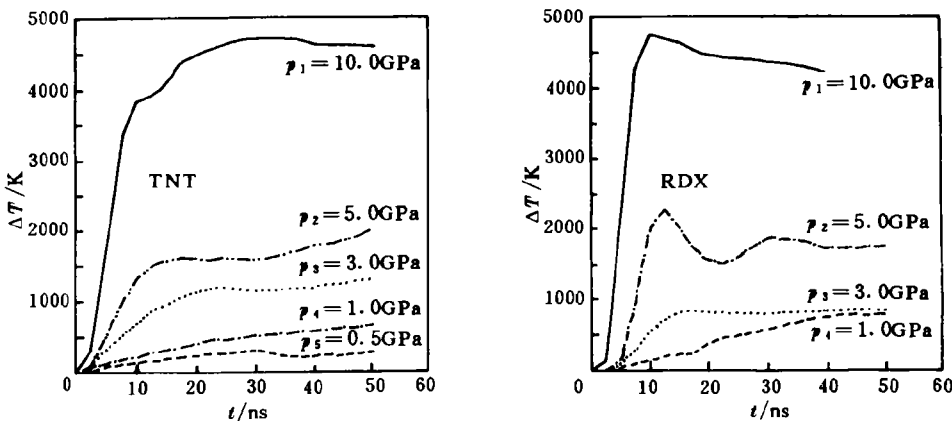


图1 微孔洞半径  $12\mu\text{m}$ 、空隙率 0.02 的胞元 A 点在不同压力作用下温升随时间变化

Fig. 1 Temperature profiles at different pressure for the point A of the cell with pore radius  $R_1=12\mu\text{m}$  and porosity  $\alpha_0=0.02$

作用下的胞元要比 0.5GPa 作用下的胞元温升大约高出 4000K。这说明在冲击波较强时, TNT 含能材料的力学行为主要应由材料状态方程描述,压缩耗散功成为导致温升的主要因素;冲击波较弱时,材料的力学行为主要应由本构方程描述,粘塑性耗散功成为导致温

升的主要因素。

#### 4.2 空隙率对热点温升的影响

图2显示空隙率对胞元温升有较大影响。空隙率越大,在微孔洞半径相同的条件下,胞元厚度越薄,在其内部能量沉积得多,温升越高;反之温升就低。

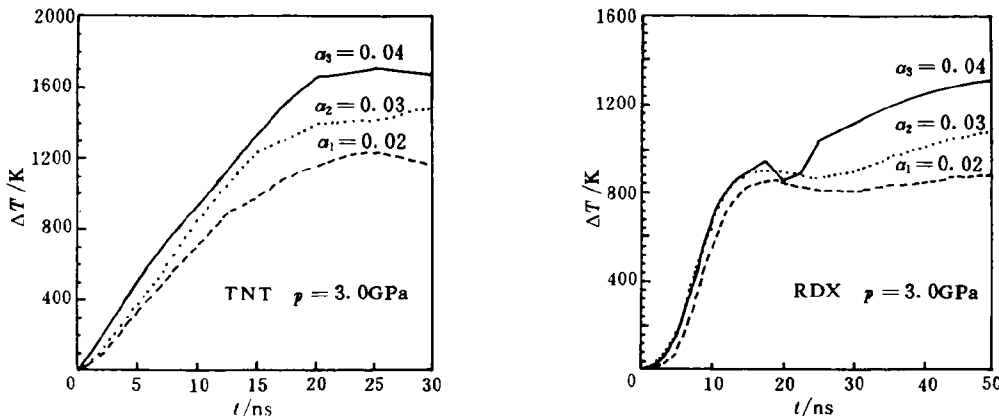


图2 微孔空半径  $12\mu\text{m}$ 、空隙率不同的胞元A点在  $p=3.0\text{GPa}$  压力作用下温升随时间变化

Fig. 2 Temperature profiles at  $p=3.0\text{GPa}$  for the point A of the cell with pore radius  $R_1=12\mu\text{m}$  and different porosity

#### 4.3 几何尺寸和形状对热点温升的影响

(1) 计算结果显示温升与胞元的时空分布坐标有较强依赖关系,这是因为在微孔洞压缩初期,随着冲击压力波波阵面的运动,变形最大的部位总是紧随波阵面之后,也即温升速率最大的区域。波阵面到内表面后,胞元整体发生变形,尤其在微孔洞表面附近有较大变形,导致微孔洞附近有一个温度梯度较大的局部温升区。压力波经自由的内表面反射后变成拉伸波,内表面附近单元被拉长,导致热点温度略微降低,然后再升高。一旦微孔洞边界附近的介质发生熔化后,其压力由于强度降低而迅速下降,该质点就会转变成屈服强度为零的液体,这时与塑性功有关的能量聚集效应可以排除;同时粘度由于受压力和温度的影响也急剧下降,使粘性功也变得很小。当微孔洞边界介质熔化后微孔洞表面温升速率减慢,能量耗散转而聚集在与熔化区相交的边界上,使该点处介质温度迅速上升,继而发生熔化。随着加载的持续,熔化区不断地扩大,直至点火。

(2) 对椭圆微孔洞,大的温度梯度主要集中在椭圆长轴附近,相对来说长轴附近温升要比短轴大得多,这是因为微孔洞表面长轴附近的变形要比短轴大;从计算中发现椭圆微孔洞比圆微孔洞易闭合。

(3) 微孔洞尺寸影响胞元温升。微孔洞越大,在其胞元表面附近能量沉积得越多,温升越高;反之温升就越低。微孔洞主要是由颗粒界面造成的,总的说来,颗粒越大,微孔洞就越大;反之就小。在初始密度一定的条件下,对细颗粒装药,由于其具有较小的微孔洞尺寸分布,不论从微孔洞边界的最高温度,还是热点尺寸来看,熔化都强烈地降低了它的点火感度。

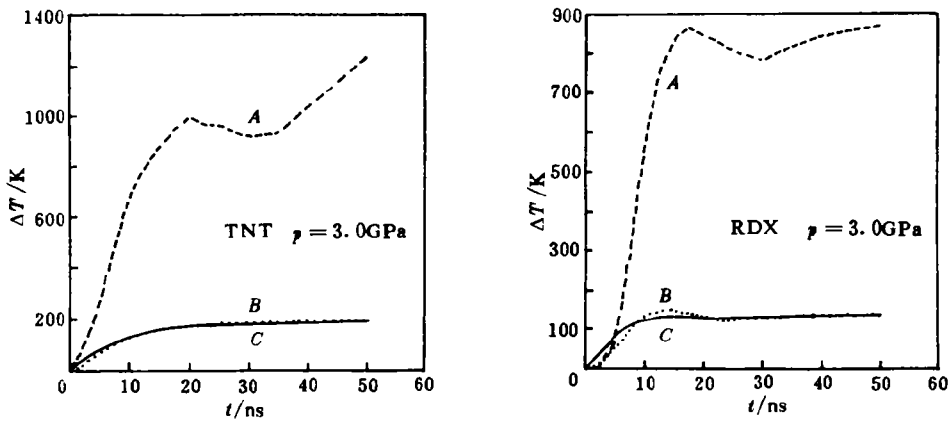


图3 微孔洞半径  $12\mu\text{m}$ 、空隙率  $0.02$  的胞元温升随时间变化

Fig. 3 Temperature profiles for the cell with pore radius  $R_1=12\mu\text{m}$  and porosity  $\alpha_0=0.02$

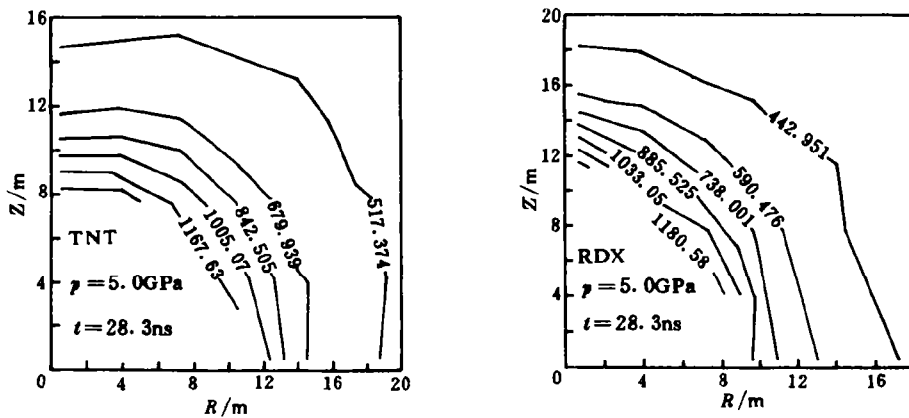


图4 微孔洞半径  $12\mu\text{m}$ 、空隙率  $0.02$  的胞元温升分布

Fig. 4 Temperature-rising distribution for the cell with pore radius  $R_1=12\mu\text{m}$  and porosity  $\alpha_0=0.02$

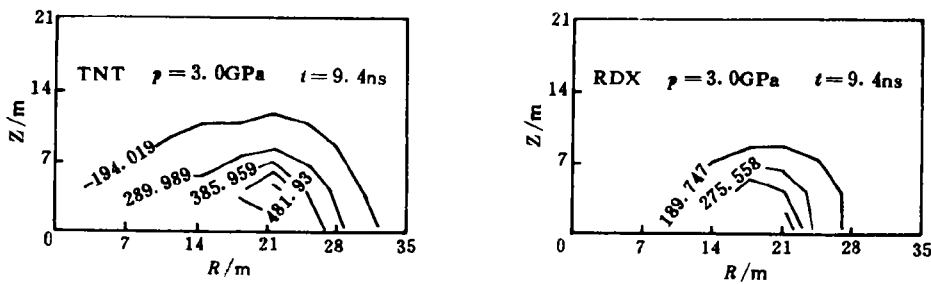


图5 椭圆微孔洞长短轴半径  $24,6\mu\text{m}$  和空隙率  $0.02$  的胞元温升分布

Fig. 5 Temperature-rising distribution for the ellipsoidal pore with semi-major axes  $R_{11}=24\mu\text{m}$ , semi-minor axes  $R_{12}=6\mu\text{m}$  and porosity  $\alpha_0=0.02$

#### 4.4 熔点对热点温升的影响

计算结果显示,在相同条件下 TNT 远比 RDX 易于熔化,这主要是由于常压下 TNT 的熔点比 RDX 低得多的缘故,尽管 RDX 热点温度高达几千度,但压力也相当高,这样由(1)式可知 RDX 是不易融化的。从前面分析知微孔洞边界介质熔化后微孔洞表面温升速率减慢,这样同 RDX 相比,熔化可能会降低 TNT 的点火感度。

值得提出:当熔化发生时,导致温升的耗散功中应减去由于材料发生相变而吸收的能量,经计算可知相变潜热仅对 TNT 在较低冲击作用下的计算结果有影响,故计算结果比实际温升略高,但对别的情况影响不大,所以我们没考虑相变潜热的影响。

总之,在冲击作用下微孔洞表面附近介质达到点火温度,是含能材料点火的必要条件,但不是充分条件。热点能够发展成点火,要由充分深的加热层存在和足够长的持续时间来保证。一方面只有存在一定的温度梯度才能保证加热层的深度;另一方面在冲击压缩过程中微孔洞表面温升速率极快,冷却速率也很高,如果冲击波持续时间很短,微孔洞表面温度也会很快降下来。

## 5 结 论

(1)采用轴对称动力有限元并用流体弹塑性体模型来进行凝聚态含能材料热点形成过程的数值模拟是可行的。它不仅得到热点温升的变化趋势,而且可以模拟热点形成的细观过程,特别是模拟能量在微孔洞表面沉积的机理,这为进一步开展含能材料热点机理的研究奠定了基础。

(2)从数值模拟基本假设和计算方法来看,目前文献采用的多为球对称不可压模型。与文献相比,我们所采用的基本假设较为实际,计算结果较合理,计算能力较强,可用于研究绝热剪切机理<sup>[7]</sup>。

在计算中得到张举华博士后的帮助,在此表示感谢!

### 参 考 文 献

- 1 Frey R B. Cavity Collapse in Energetic Materials. BRL-TR-2748, 1986
- 2 Khasainov B A, Borisov A A, Ermolaev B S et al. Two-Phase Visco-Plastic Model of Shock Initiation of Detonation on High Density Pressed Explosives. In: Short J M ed. Proceedings 7th Symposium (International) on Detonation, Maryland; Naval Surface Weapons Center, 1982. 435~447
- 3 Maiden D E, Nutt G L. A Hot Spot Model for Calculating the Threshold for Shock Initiation of Pyrotechnic Mixtures. In: Proceedings of the 11th International Pyrotechnics Seminar, Colorado; [s. n.], 1986. 813~826
- 4 Kang J, Butler P B. A Thermomechanical Analysis of Hot Spot Formation in Condensed-Phase, Energetic Materials. Combustion and Flame, 1992, 89(2): 117~139
- 5 张振宇, 浣石, 卢芳云, 等. 多孔 TNT 炸药中热点形成的粘塑性塌缩机理. 含能材料, 1994, 2(2): 36~41
- 6 Carroll M M, Holt A C. Static and Dynamic Pore-Collapse Relations for Ductile Porous Materials. Applied Physics, 1972, 43(4): 1626~1636
- 7 Chou P C, Hashemi J, Chou A. Experimentation and Finite Element Simulation of Adiabatic Shear Bands in Controlled Penetration Impact. J Impact Engng, 1991, 11(3)

---

## A THERMOMECHANICAL ANALYSIS OF SHOCK-INDUCED HOT SPOT FORMATION IN CONDENSED ENERGETIC MATERIALS

Zhang Taihua, Zhao Zhuanghua, Fan Shijun  
(*Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an, 710065*)

**ABSTRACT** The mechanics of shock-induced hot spot formation in energetic materials is studied by using a finite element program. When the condensed phase of energetic materials is compressible, the configurations of hollow spheres and ellipsoids are used to simulate the dynamic and thermo-mechanical response of a single pore centered at the field of condensed TNT and RDX explosives. The results show that shock strength, porosity, cavity size and configuration, melting point have influences on hot spot formation. The conditions of which the mechanism of viscoplastic work and solid phase compression dominate are discussed

**KEY WORDS** energetic materials, hot spot, viscoplastic work, solid phase compression