

文章编号: 1001-1455(2008)06-0488-06

炸药冲击响应的二维细观离散元模拟*

于继东, 王文强, 刘仓理, 赵峰, 孙承纬

(中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理实验室, 四川 绵阳 621900)

摘要: 用离散元法在颗粒尺度模拟了塑料粘接炸药的冲击响应。炸药的细观结构基于 Voronoi 拼图建成。以含孔洞和不含孔洞的炸药模型为例, 说明细观结构对热点的形成和分布有重要影响。在这些算例中, 粘塑性变形是温度局域化的主要原因, 而摩擦和体积粘性等机制可以忽略。

关键词: 爆炸力学; 冲击响应; 离散元方法; 塑料粘接炸药; 热点

中图分类号: O347.5; TD235

国标学科代码: 130·35

文献标志码: A

1 引言

凝聚炸药在冲击作用下, 由于细观不均匀性, 某些局部区域的温度可以比平均温度高很多, 成为首先发生反应的热点。热点的形成、成长和相互作用是理解非均质炸药起爆的关键。多年来尽管提出了多种热点机制, 但是由于实验观测十分困难, 在具体问题中, 对于占主导地位的热点机制, 常常只能推测, 而难以确认^[1]。目前对于炸药在冲击作用下的细观响应特征, 还只能通过数值模拟进行研究。细观数值模拟可以展示细观结构特别是热点的演化, 确定在不同问题中细观结构的影响和热点的主要机制, 揭示从热点燃烧发展到流体动力学机制占主导地位的爆轰波的过程和爆轰波的结构, 为建立可用于工程计算的宏观模型提供依据。

目前, 我国基本上还未开展这方面工作。国外已发表的工作主要是 20 世纪 90 年代以来, 在美国几个国家实验室和大学进行的。P. A. Conley 等^[2]用二维欧拉有限元程序模拟了 HMX 颗粒炸药和塑料粘结炸药的冲击起爆, 研究了热点的演化, 以及颗粒尺寸、颗粒间孔穴、有无粘结剂、粘结剂材料性质等因素的影响。R. Menikoff^[3]用同一个程序模拟了在较低压力水平下颗粒炸药 HMX 中的压实波, 指出为了发展更好的燃烧模型, 必须借助于颗粒尺度的细观模拟。S. G. Bardenhagen 等^[4]用 MPM 方法 (material point method) 模拟了颗粒炸药 HMX 的弱冲击响应。着重研究了应力传播的路径, 即应力桥问题, 这是非均质材料中造成应力和能量集中的重要原因。M. R. Baer 等^[5]用三维欧拉有限体积程序 CTH 模拟了 HMX 和塑料粘结炸药的冲击起爆, 计算模型为不同大小的任意多面体形状颗粒的随机堆积, 计算中考虑了化学反应。

炸药复杂的细观结构和多样的热点机制对计算方法提出了很高的要求。对于在冲击作用下可能发生的孔洞塌缩、剪切带、断裂、闭合裂纹摩擦、颗粒间摩擦等多种事件, 目前还没有一种完美的计算方法。例如前面提到的欧拉有限元和有限体积程序, 可以计算大变形, 却难以处理界面摩擦, 而拉格朗日程序则相反。另外, 这些方法对于断裂的处理过于简化, 不适合描述裂纹的产生、闭合、摩擦等。

基于以上认识, 本文中尝试用一种不同的方法, 即离散元法模拟炸药的冲击响应。以往的研究表明该方法容易处理大变形、摩擦、断裂等问题。本文结果初步显示离散元法是适用于炸药冲击响应细观模拟的一种有效的方法。

* 收稿日期: 2007-05-21; 修回日期: 2007-07-02

基金项目: 中国工程物理研究院科学技术重大基金项目(2005Z0101)

作者简介: 于继东(1981—), 男, 博士研究生, 助理研究员。

2 离散元方法简介

本文采用的计算方法,在力学和物理学文献中,分别称为离散元法^[6-9]和格子模型^[10-14]。名称不同,思想一样。前者强调方法,后者强调物理模型,具有计算方法和物理模型双重身份。研究连续介质时,离散元法是将介质直接离散为元(或质点),根据材料性质确定元间作用力模型,通过求解元的控制方程(牛顿第二定律)获知整个系统的演化规律(形变、断裂、相变等)。离散元法与有限差分、有限体积和有限元法在形式上的区别为无网格,实质的区别是,它不以连续介质力学方程组为出发点和求解对象。这也将离散元法与其他无网格方法区别开来,因为所有这些方法仍是在连续介质理论框架内的。

本文中离散元方法的基本概念(邻居关系、作用力模型、温度和应力计算等)在文献^[15]中有系统阐述,在此不再重述。改进之处主要是按照文献中代表体元^[16]的概念对体应变和剪应变进行了新的定义和计算。考虑了邻居元之间的5种作用力:法向中心势作用力(由 Hugoniot 关系导出^[16])、切变力(理想弹塑性模型)、法向和切向粘性力、干摩擦力。法向和切向力分别对应于体应变和剪应变。塑性、粘性、摩擦导致能量耗散而使温度增加。

3 炸药的细观离散元模型

为实现炸药冲击响应的细观数值模拟,需要建立适当的细观计算模型,包括几何模型和物理模型。

3.1 炸药细观离散元模拟的几何模型

塑料粘结炸药是由炸药晶粒与少量粘结剂粘结而成,其中炸药颗粒具有各种不同的形状及一定的尺寸分布。作为初步的尝试,以 Voronoi 拼图为基础,建立反映炸药细观结构的离散元几何模型。步骤如下:(1) 将一指定平面区域划分为 Voronoi 拼图,再将拼图内所有多边形向各自内部收缩,在多边形之间留出一定空隙;(2) 将各多边形(代表炸药颗粒)进一步划分为三角密排的离散元,并各旋转一个随机的角度(以表示晶粒的随机取向);(3) 在多边形之间的空隙填充代表粘结剂的离散元,即构成塑料粘结炸药的离散元几何模型,若去掉某些离散元,则可在粘结剂和炸药颗粒中制造孔洞。

图1为一个含53个颗粒的炸药细观模型,其颗粒分布近似为单峰正态分布,平均直径 $86\ \mu\text{m}$,炸药颗粒和粘结剂的离散元直径分别为 $4\ \mu\text{m}$ 和 $2\ \mu\text{m}$,图中横坐标 D 为颗粒直径,纵坐标 φ 为颗粒体积分数。需要指出的是,Voronoi 拼图能很好地表征金属的多晶结构,但不能精确地反映炸药颗粒的尺寸分布(PBX 系列炸药多为双峰分布),这有待于今后改进。

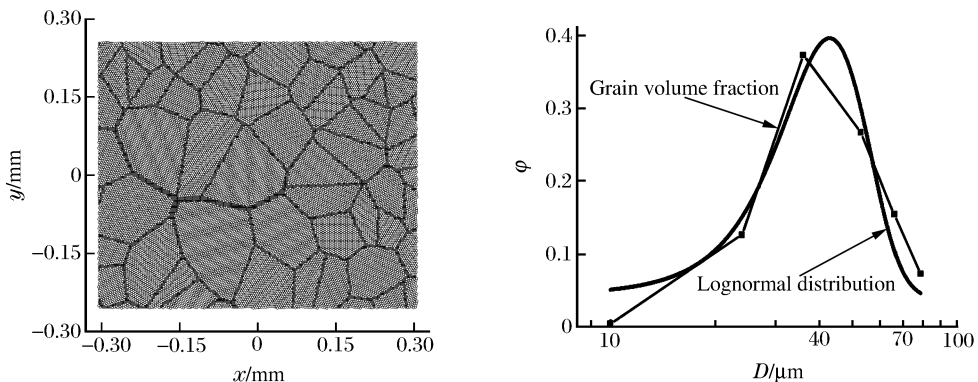


图1 炸药的细观离散元模型及颗粒的尺寸分布

Fig. 1 Mesoscale discrete element model of explosive and particle size distribution of the model

3.2 炸药细观离散元模拟的物理模型

关于炸药晶体和粘结剂的力学、物理和化学性质,有些已得到可靠的数据,有些还研究得很不充分,是正在努力攻关的难题。目前国外主要是通过量子化学和分子动力学计算、实验等方式进行研究。

考虑到 HMX 塑料粘结炸药在实际应用中的重要性,并且相关数据较易获得,本文中以 HMX 作为

具体模拟对象。R. Menikoff 等^[17]近年对 HMX 晶体的各种性质(断裂和化学反应除外)做了较全面的综述;关于粘结剂,其力学响应一般为粘弹性或粘弹塑性,在文献中可找到零星的数据。本文中只考虑 HMX 和粘结剂的力学和热学性质,未涉及固固相变、固液相变、化学反应等复杂因素。表 1 为从文献^[2,17]直接或换算得到的、用于本文离散元模拟的物理参数,其中 ρ 为密度, c_0 和 λ 为状态方程参数, G 为剪切模量, ϵ_y 为屈服应变, η 为剪切粘性参数, ϵ_b 为法向断裂应变, c_V 为定容热容。

表 1 计算所用材料参数

Table 1 Material parameters used in the simulations

材料	$\rho/(\text{g}/\text{cm}^3)$	$c_0/(\text{km}/\text{s})$	λ	G/GPa	ϵ_y	η	ϵ_b	$c_V/(\text{kJ}/(\text{kg} \cdot \text{K}))$
HMX	1.9	2.90	2.06	12.0	0.02	310	0.003	1.5
粘结剂	1.1	2.35	1.70	1.2	0.02	31	0.003	1.5
HMX-粘结剂		2.62	1.88	2.2	0.02	170	0.003	

4 炸药冲击响应的细观离散元模拟

4.1 塑料粘结炸药的冲击响应

计算模型如图 2 所示。含 30 个 HMX 颗粒, 9 983 个 HMX 离散元(直径 $4 \mu\text{m}$)和 4 202 个粘结剂离散元(直径 $2 \mu\text{m}$)。飞片为粘结剂材料,含 5 729 个离散元(直径 $4 \mu\text{m}$),初速 $1 \text{ km}/\text{s}$ 。左右边界为滑移固壁,上下边界为自由面。时间步长为 15 ps 。模拟结果清楚地显示冲击波自碰撞面向远处传播,以及炸药中热点的形成和演化。图 3 为 45 ns 时 HMX 颗粒和飞片的应力(y 方向分量)等值图,图 4(a)为 120 ns 时 HMX 颗粒的温度等值图。可见由于细观结构不均匀,应力和温度的分布也不均匀。

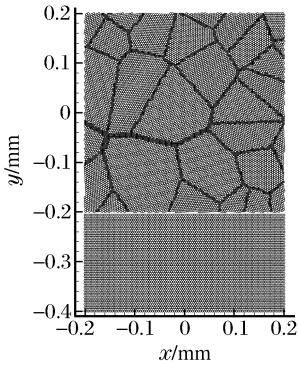


图 2 计算模型

Fig. 2 Computational model

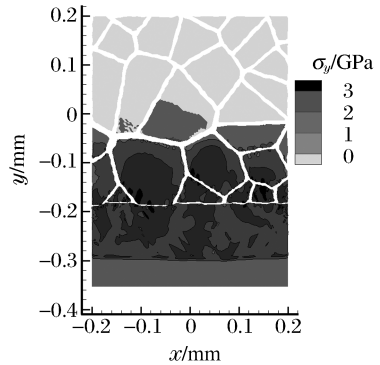


图 3 45 ns 时的应力等值图

Fig. 3 Stress contour at 45 ns

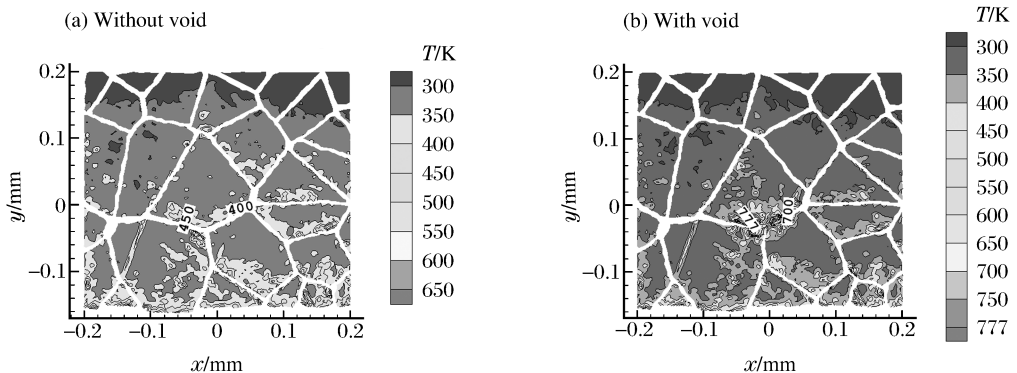


图 4 120 ns 时的温度等值图

Fig. 4 Temperature contours at 120 ns

4.2 含孔洞塑料粘结炸药的冲击响应

计算模型为在图 3 的模型中以 $(0 \mu\text{m}, -50 \mu\text{m})$ 为圆心挖掉一半径 $25 \mu\text{m}$ 的圆孔,其他条件不变。模拟结果清楚地显示了孔洞的塌缩和热点的形成。

图 4 为 120 ns 时,无孔洞和有孔洞模型的温度分布的对比图(只显示 HMX 颗粒),可见孔洞塌缩使当地热点温度显著升高。

图 5 为孔洞塌缩的 4 个典型时刻, 45 ns 时加载应力波刚到孔洞的下边界, 72 ns 时加载波到达孔洞的上边界, 93 ns 时孔洞基本闭合, 120 ns 时孔洞完全闭合。

为考察孔洞对其周围应力(y 分量)、粒子速度(y 分量)和温度的影响,在初始模型中选定中心为孔洞中心、边长为 $70 \mu\text{m}$ 的正方形区域内的 HMX 单元,每隔 50 时间步计算并记录这些参量对单元的平均值。图 6 为这些平均值随时间的变化曲线,粗线和细线分别对应于无孔洞和有孔洞的情况。

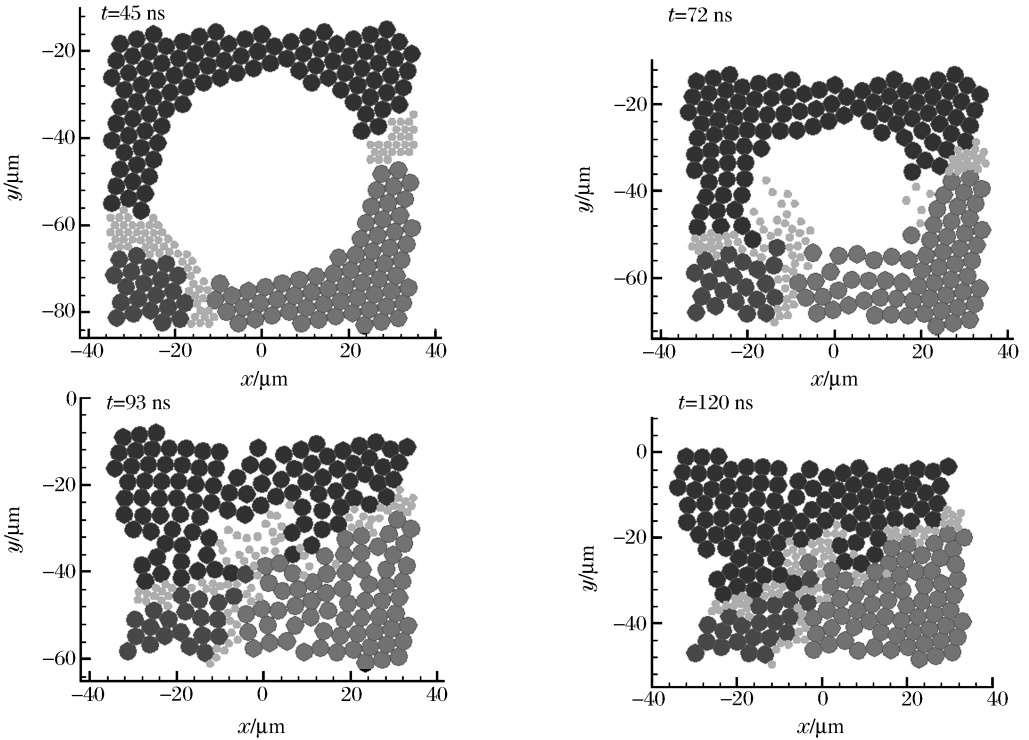


图 5 孔洞塌缩过程

Fig. 5 The process of void collapse

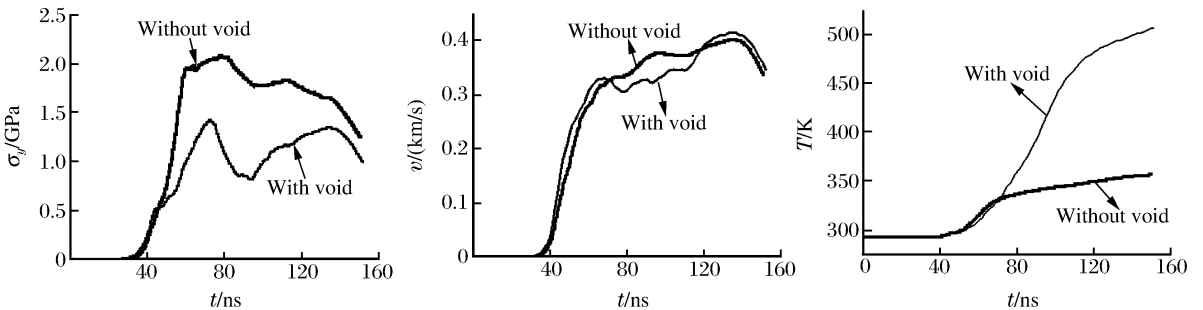


图 6 选定区域内 HMX 单元的平均应力、粒子速度和温度的历史曲线

Fig. 6 Histories of average stress, particle velocity and temperature of HMX elements in a specific region

在两种算例中,来自飞片后自由面的稀疏波都在约 140 ns 时到达上述计算平均值的区域,此时可看到应力和粒子速度均明显下降。无孔洞情况的应力平均值曲线在 60~140 ns 的波动行为应为软硬材料结合的细观结构所致。有孔洞情况的应力平均值曲线可作如下理解:在 45 ns 时加载应力波刚到孔洞的下边界,孔洞尚未产生影响,因此之前一段曲线与无孔洞情况的曲线基本重合,之后由于孔洞边界的卸载作用,应力平均值的增长明显缓于无孔洞情况,在 72 ns 时加载波到达孔洞的上边界,此后由于边界卸载作用,应力一直下降,至 93 ns 孔洞基本闭合时再重新上升。

两种情况下,粒子速度的平均值曲线在 45 ns 之前基本重合,之后有孔洞的速度曲线高于无孔洞曲线,这是因为加载应力波到达孔洞下边界后,粒子向上运动的速度显著高于无自由空间的情况(理想条件下为倍增关系)。在 72 ns 加载波到达孔洞的上边界后,部分粒子向下运动,因此所计算区域的速度平均值又低于无孔洞情况。在 120 ns 孔洞完全压实后,两条曲线归于基本重合。

图 6 中,两温度曲线在 72 ns 前基本重合,此后孔洞开始全面塌缩,剧烈的粘塑性变形使含孔洞区域平均温度的增长明显快于无孔洞情况。在约 100 ns 时,孔洞已基本闭合,此后温度的增长趋于平缓。

5 结 论

初步探索了用离散元法在颗粒尺度模拟塑料粘结炸药的冲击响应,定性和定量结果基本合理,说明用离散元法计算此类问题是可行的。结果显示炸药的细观结构(炸药颗粒、粘接剂、孔洞等)对热点的形成和分布有重要影响。在有限元、有限差分、有限体积等计算中,一般用人工粘性代替物理上的体积粘性。本文直接采用物理的体积粘性,而不用人工粘性。但由于找不到可用的数据,因此以剪切粘性为参考值。结果表明,热点温度对体积粘性并不敏感。当体积粘性取数倍于剪切粘性的值时,与取值为零相比,额外的温升并不显著。因此粘塑性变形是本文算例中造成温升的主要原因,而体积粘性的贡献甚微。P. A. Conley 等^[18]在研究 HMX 的剪切粘性时,也发现人工粘性不重要,可以不计。此外,粘结剂由于较软,在颗粒之间变形剧烈,温度明显高于颗粒,这也与 P. A. Conley 等^[2]的模拟结果定性符合。

炸药冲击响应是一个涉及力学、热学和化学效应的复杂问题。对于这一问题,需要从多尺度、多视角入手,综合运用实验、理论、数值模拟等研究手段,才能得到全面认识。细观模拟是多尺度模拟的重要的而又最薄弱的一环。本文工作在这方面只是刚刚起步,距离为宏观工程计算模型的建立提供定量依据的目标还有很多问题需要探索。

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.
- [2] Conley P A, Benson D J. Microstructural effects in shock initiation[C]//Proceedings of the 11th International Symposium on Detonation. Snowmass, Colorado, 1998:768-780.
- [3] Menikoff R. Granular explosives and initiation sensitivity[R]. LA-UR-996023, USA: Los Alamos National Laboratory, 1999.
- [4] Bardenhagen S G, Roessig K M, Guilkey J E, et al. Direct numerical simulation of weak shocks in granular material[C]//Proceedings of the 12th Symposium (International) on Detonation. Sharon Crowder, California, 2002:497-503.
- [5] Baer M R. Micromechanical modeling of heterogeneous energetic materials[C]//Proceedings of the 11th Symposium (International) on Detonation. Snowmass, Colorado, 1998:788-797.
- [6] Cundall P A, Strack O D L. A discrete numerical model for granular assemblies[J]. Geotechnique, 1979,29(1): 47-65.
- [7] Donze F V, Magnier S A, Audeville L D. Numerical study of compressive behavior of concrete at high strain rates [J]. Journal of Engineering Mechanics, 1999,125(10):1154-1163.
- [8] Donze F V, Bouchea J, Magnier S A. Modeling fractures in rock blasting[J]. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 1997,34(8):1153-1163.

- [9] Buttlar W G, You Z. Discrete element modeling of asphalt concrete: A micro-fabric approach[C]// Skinner R E. Annual Meeting of the Transportation Research Board. Washinton D C, 2001.
- [10] Slepyan L I. Models and Phenomena in Fracture Mechanics[M]. Berlin: Springer, 2002.
- [11] Fineberg J, Marder M. Instability in dynamic fracture[J]. Physics Reports, 1999, 313(1-2): 1-108.
- [12] Sander L M, Ghaisas S V. Thermal noise and the branching threshold in brittle fracture[J]. Physical Review Letters, 1999, 83(10): 1994-1997.
- [13] Kresse O, Truskinovsky L. Lattice friction for ccrystalline defects: From dislocations to cracks[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2004, 52(11): 2521-2543.
- [14] Truskinovsky L, Vainchtein A. The origin of nucleation peak in transformational plasticity[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2004, 52(8): 1421-1446.
- [15] Tang Z P, Horie Y, Psakhie S G. Meso-element modeling of shock processes in powders[C]// Graham R A. High Pressure Shock Compression of Solids IV. New York: Springer, 1997: 143-176.
- [16] Case S, Horie Y. Discrete element simulation of shock wave propagation in polycrystalline copper[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2007, 55(3): 589-614.
- [17] Menikoff R, Sewell T D. Constituent Properties of HMX Needed for Meso-Scale Simulations[R]. LA-UR-00-3804-rev. USA: Los Alamos National Laboratory, 2001.
- [18] Conley P A, Benson D J. An estimate of the linear strain rate dependence of octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine[J]. Journal of Applied Physics, 1999, 86(12): 6717-6728.

Two-dimensional mesoscale discrete element simulation of shock response of explosives

YU Ji-dong, WANG Wen-qiang*, LIU Cang-li, ZHAO Feng, SUN Cheng-wei
(Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics,
China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, Sichuan, China)

Abstract: Shock response of plastic bonded explosives were simulated at the grain scale using the discrete element method. The mesoscopic structures of explosives were created based on the Voronoi tessellation. Through simulations on explosives with and without a pore inside, the important impact of mesoscopic structure on the formation and distribution of hot spots was demonstrated. In these sample calculations, it is found that the temperature localization is mainly due to visco-plastic deformation whereas the mechanisms of friction and bulk viscosity can be ignored.

Key words: mechanics of explosion; shock response; discrete element method; plastic bonded explosives; hot spots

* Corresponding author: WANG Wen-qiang
E-mail address: wwq_mech@hotmail.com
Telephone: 86-816-2485114