

文章编号: 1001-1455(2008)06-0515-06

细观尺度下塑料粘结炸药热点生成的初步模拟*

傅 华, 刘仓理, 王文强, 谭多望, 李 涛

(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: 采用有限元与离散元相结合的方法模拟了塑料粘结炸药在冲击载荷下热点生成的细观过程, 计算中炸药晶体采用有限元法, 粘结剂采用离散元法。结果表明热点多集中在晶体间变形较大的粘结剂部分, 粘结剂与晶体间冲击波的相互作用是热点生成的重要原因; HMX 晶体温度明显低于粘结剂, 且晶体边界温度高于内部温度。

关键词: 流体力学; 热点; 细观模拟; 塑料粘结炸药; 有限元; 离散元

中图分类号: O353.4 **国标学科代码:** 130·25 **文献标志码:** A

1 引 言

炸药是核武器与常规武器中的重要部件。A. W. Campbell 等^[1]已从实验上揭示, 均质与非均质凝聚炸药有着完全不同的冲击起爆机理。均质凝聚炸药冲击起爆的热爆炸模型已为人们普遍接受, 但是实际应用的固态炸药一般都是非均质炸药, 由于固态炸药的起爆特性受到炸药颗粒度、空隙率和添加剂、粘结剂等的影响, 使得对这一问题的研究无论是从实验上还是理论上都变得十分复杂和困难。对这类炸药的起爆机理, 目前大家所公认的是冲击作用在炸药中产生局部高温区, 即产生热点, 然后是炸药分解, 最后引起爆炸。热点的形成、点火以及成长过程已成为理解非均质炸药冲击起爆的关键。

近年来对非均质炸药热点机制的细观数值模拟已成为爆轰物理研究的前沿课题。P. A. Conley 等^[2]用二维欧拉有限元程序 RAVEN 研究了颗粒炸药(HMX)和塑料粘结炸药细观结构变化对冲击起爆的影响。R. Menikoff^[3]用同一个程序模拟了在较低压力下 HMX 中的细观响应, 结果表明热点常发生在颗粒间接触处; S. G. Bardenhagen 等^[4]采用 MPM 方法(material point method)模拟了 HMX 的弱冲击响应。M. R. Baer 等^[5]利用三维 CTH 程序模拟了不同细观结构的 HMX 和塑料粘结炸药的热点生成到起爆的过程。

有限元等传统数值方法适合解决连续介质问题, 而离散元法适合界面弱连接的非连续介质问题或连续体到非连续体转化的材料损伤破坏问题。因此将离散元法与有限元法有机地结合起来, 充分发挥各自的长处, 可以极大地扩大数值方法的应用范围, 特别是在模拟细观多相材料动态特征的研究方面, 其优势尤为突出。本文中采用自编的有限元与离散元结合的计算程序, 初步模拟了以 HMX 为基的塑料粘结炸药的热点生成过程。

2 有限元温升计算

静水压力 p 由 Mie-Grüneisen 状态方程确定^[6]

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

式中: $\mu = \rho/\rho_0 - 1$ (ρ, ρ_0 分别是当前材料密度和初始材料密度), K_1, K_2, K_3 是材料常数, Γ 是 Grüneisen 系数, E_s 是内能。

* 收稿日期: 2007-05-31; 修回日期: 2008-01-17

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: 傅 华(1979—), 男, 硕士, 助理研究员。

应力偏量和应变偏量间用增量型的弹性本构关系。数值计算中通常采用下式计算

$$s_{ij} = 2Ge_{ij} \quad (2)$$

式中: s_{ij} 、 e_{ij} 分别是应力、应变偏量张量, G 是剪切模量。如果材料进入塑性屈服, 用 Mises 屈服准则描述并修正。

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

$$dE_s = -(p + q)\dot{\epsilon}_v dt + dE_d \quad (3)$$

式中: $\dot{\epsilon}_v$ 是体积应变率, E_d 为偏应力和剪应力所作的功, 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

$$T = T_0 + E_s / (c \rho_0) \quad (4)$$

式中: T 为单元温度, T_0 为单元初始温度, E_s 为单元内能, c 为材料的质量热容。

有限元求解步长的稳定性要求取决于所用的差分格式, 本文中采用的中心差分法是条件稳定, 要求

$$\Delta t = h_{\min} / c_0 \quad (5)$$

式中: h_{\min} 为有限元三角形最小高, c_0 为声速。

3 离散元升温计算

3.1 离散元法

离散元法 (DEM, discrete element method) 的思想源于较早的分子动力学 (molecular dynamics)。离散元法的基本思想是把不连续体或连续体离散为具有一定物理意义的独立微元或粒子, 相邻的单元之间存在一种或几种作用力, 单元的运动受牛顿第二运动定律支配, 用时间步长迭代的方法求解各单元的运动方程, 通过研究离散元系统的整体运动形态得到模拟对象的力学、热学、物理和化学的状态分布和演化规律

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}^i}{dt^2} = \sum_{j=1}^n \mathbf{f}_{ji} + \mathbf{F}^i \quad (6)$$

$$\mathbf{J}^i \frac{d^2 \boldsymbol{\theta}^i}{dt^2} = \sum_{j=1}^n \mathbf{k}_{ji} + \mathbf{K}^i \quad (7)$$

式(6)是力作用下的运动方程。其中 m_i 为单元 i 的质量; \mathbf{r}^i 一般为单元 i 形心的位移矢量; \mathbf{f}_{ji} 表示与单元 i 接触的某单元 j 对单元 i 的接触力; \mathbf{F}^i 为单元 i 所受的其他外力, 如在研究流场作用下的固体颗粒的作用时, 该项代表流体压力等效的结点作用力, n 为与单元 i 接触的单元数目。式(7)为力矩作用下的运动方程, 其中 \mathbf{J}^i 为单元 i 的转动惯量; $\boldsymbol{\theta}^i$ 为单元 i 的转角, \mathbf{k}_{ji} 表示与单元 i 接触的某单元 j 对单元 i 的力矩; \mathbf{K}^i 为单元 i 所受的其他外力矩。

在物体的离散化方面, 离散元法的离散思想同有限元法有着相似之处, 即将所研究的区域划分成各种单元, 一般情况下二维问题用圆盘单元, 三维问题用球体单元, 通过节点建立单元间的联系。

3.2 离散元间作用力^[7-8]

3.2.1 中心势作用力

中心势作用力 \mathbf{p}^{ij} 采用准分子相互作用力模型, 如 Lennard-Jones 势

$$\mathbf{p}^{ij} = \frac{\alpha^{ij} m n}{r_0^{ij} (n - m)} \left[\left(\frac{r^{ij}}{r_0^{ij}} \right)^{-(n+1)} - \left(\frac{r^{ij}}{r_0^{ij}} \right)^{-(m+1)} \right] \mathbf{n}^{ij} \quad (8)$$

式中: \mathbf{n}^{ij} 为单元 i 中心指向单元 j 中心的单位矢量, r^{ij} 为两元的中心距离, α^{ij} 、 r_0^{ij} 、 m 、 n 为作用力参数。也可采用其他形式, 如 Morse 势等。

3.2.2 粘性摩擦力

粘性摩擦力可分解为切向和法向两部分。

$$\mathbf{f}_v^i = - [\eta_1^i v_t^i + \eta_2^i (v_t^i)^2] \mathbf{v}_t^i / v_t^i \quad (9)$$

$$f_{v_n}^{ij} = -C_n v_n^{ij} \quad (10)$$

式中： η_1^{ij} 、 η_2^{ij} 、 C_n 为粘性系数， v_t^{ij} 、 v_n^{ij} 分别是在接触点 S 处单元 i 相对于单元 j 的切向和法向速度，如图 1 所示。法向粘性摩擦力可用于模拟邻居单元之间的非弹性碰撞和抑制高频振荡。

不考虑离散元的转动，在接触点 S 处单元 i 相对于单元 j 的速度

$$v_s^{ij} = v^i - v^j \quad (11)$$

可导出接触点处相对切向和法向速度

$$\begin{cases} v_t^{ij} = n^{ij} \times v_s^{ij} \times n^{ij} \\ v_n^{ij} = (v_s^{ij} \cdot n^{ij}) n^{ij} \end{cases} \quad (12)$$

3.2.3 干摩擦

假定只考虑动摩擦，则单元 i 作用于单元 j 的干摩擦力

$$f_d^{ij} = -\mu^j p^{ij} (v_t^{ij} / v^{ij}) \quad p^{ij} > 0 \text{ 且 } v_t^{ij} \neq 0 \quad (13)$$

式中： μ^j 为 Coulomb 摩擦因数。

3.2.4 剪切力

剪切力仅仅发生于邻居单元之间，单元 i 作用于邻居单元 j 的剪切力

$$f_s^{ij} = -G^{ij} \gamma^{ij} A^{ij} t \quad (14)$$

式中： G^{ij} 是有效剪切模量， γ^{ij} 是两单元间的距离， A^{ij} 是有效接触面积， t 为切向矢量。

3.3 温升计算

离散元单元的塑性变形和单元间摩擦引起能量耗散，从而导致离散单元温度的升高。在一个时间步长内邻居单元间耗散能增量

$$de^i = \sum_{j=1}^n (de_{v_n}^{ij} + de_{v_t}^{ij} + de_d^{ij} + de_s^{ij}) \quad (15)$$

式中： v_n 、 v_t 、 d 、 s 分别表示法向粘性摩擦、切向粘性摩擦、干摩擦、塑性剪切变形。上式各项可用下式表达

$$\begin{cases} de_{v_n}^{ij} = C_{v_n} | f_{v_n}^{ij} v_n^{ij} | \Delta t \\ de_{v_t}^{ij} = C_{v_t} | f_{v_t}^{ij} v_t^{ij} | \Delta t \\ de_d^{ij} = C_d | f_d^{ij} v_t^{ij} | \Delta t \\ de_s^{ij} = C_s | f_s^{ij} \Delta \gamma^{ij} | \end{cases} \quad (16)$$

式中： C_{v_n} 、 C_{v_t} 、 C_d 、 C_s 是单元 i 对单元 j 耗散能的分配系数。理论上讲，耗散量的分配原则与质量、物理过程、热动力学有关。一般认为摩擦耗散能全部转化为热，塑性变形部分的 90% 转化为热。即有

$$C_{v_n} = C_{v_t} = C_d = 0.5, \quad C_s = 0.45 \quad (17)$$

由于加载过程为瞬态过程，一个时间步长内单元间的相互作用为绝热过程，那么

$$\Delta T^i = \frac{de^i}{c_v^i m^i} \quad (18)$$

式中： c_v^i 是单元 i 的质量热容， m^i 为单元 i 的质量。

离散元求解步长的稳定性要求比较繁琐，主要有几何和物理两方面的限制。几何方面，单元 i 和单元 j 不允许在一个时间步长内沿它们的中心轴线互相贯穿对方。物理方面，要求一个时间步长内所产生的动量转移不应超过整个碰撞过程中全部的动量转移。最终离散元时间步长可写为

$$\Delta t \leq d_0^i / c_{ij}^i \quad (19)$$

式中： $d_0^i = r_0^i + r_0^j$ ，等效声速 $c_{ij}^i = \sqrt{3(1+\beta)E_0^j / [2(2-\varphi)\rho^j]}$ ， $\beta = m^j / m^i$ ， E_0^j 为等效模量， $\varphi \in [0, 1]$ 为非弹性系数。为了保证足够的分辨率，离散元所取的时间步长往往是临界步长的几百分之一。

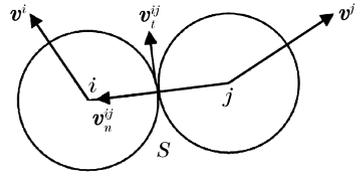


图 1 单元 i 与单元 j 的作用

Fig. 1 Interaction between the elements i and j

4 结合方法

由于离散元法并不严格遵守3个基本守恒方程,与传统的连续介质力学计算方法有着不同的控制方程;此外,离散元法中本构关系、物理量的求解与有限元法也有差异,这都为两种方法的结合带来了困难,要使两种方法能有效地结合在同一计算模型中,关键是使离散单元与有限单元之间的各种物理参数有一个平滑的过渡。

在计算离散单元作用力时,只有与此单元相邻的元(即邻居元)才会对此单元发生关系,考虑到离散元的这一特性,结合有限元的计算特点,采用图2所示含有一层过渡层的结合模型,具体结合方法及验证过程见文献[9]。

在编写的二维程序中,每一个时间步长内,过渡边界中的离散元和有限元相互为对方提供边界条件。所取的时间步长同时满足有限元与离散元两种算法的稳定性要求。

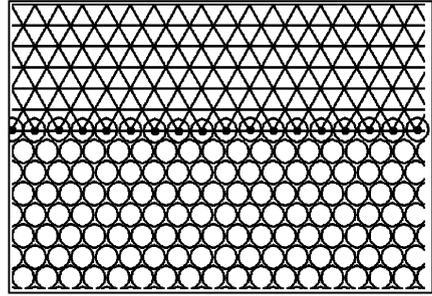


图2 有限元与离散元结合简图

Fig. 2 Combination of finite elements and discrete elements through transition layer

5 热点细观模拟

热点的细观模拟以炸药晶体与粘结剂按一定配比组成的PBX9501炸药为对象,为了能在细观尺度上模拟非均质炸药热点的生成,采用当前被广泛应用于构建金属晶体计算模型的Voronoi拼图,对在二维平面随机生成的Voronoi拼图进行适当缩放,建立适合PBX炸药热点模拟的计算模型。计算模型如图3所示,尺寸为 $300\ \mu\text{m} \times 400\ \mu\text{m}$,图中不规则多边形是划分为等边三角形有限元网格的HMX晶体,网格边长为 $2\ \mu\text{m}$,其余部分为离散为圆盘形离散单元的粘结剂,单元半径为 $1\ \mu\text{m}$ 。在建立PBX炸药细观计算模型过程中,并没有严格遵照实际炸药中HMX与粘结剂的配比,这将影响定量的结果,但对定性的结论不会改变。

下方施加脉冲载荷,强度 $p=0.5\ \text{GPa}$,持续时间 $t=0.02\ \mu\text{s}$,有限元本构采用弹塑性模型,离散元本构方程采用“朱-王-唐”非线性粘弹性模型,计算参数见表1,其中 F_y 、 F_u 是HMX的屈服强度与极限强度。

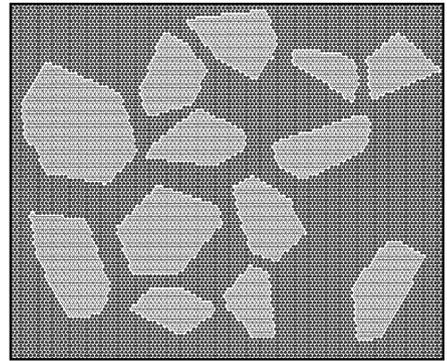


图3 PBX9501炸药的计算模型

Fig. 3 Computation model of PBX9501

表1 计算参数

Table 1 Simulation parameters

方法	材料	$\rho/(\text{g}/\text{cm}^3)$	$c_v/(\text{J}/(\text{g} \cdot \text{K}))$	$a^{\ddot{v}}/(\text{MN}/\text{cm}^2)$	C_n	$\mu^{\ddot{v}}$	m	n	η_1	η_2
DEM	Binde	1.27	0.423	0.229	301	0.01	1	3	0.1	0
方法	材料	$\rho/(\text{g}/\text{cm}^3)$	$c_v/(\text{J}/(\text{g} \cdot \text{K}))$	G/GPa	F_y/MPa	F_u/MPa	K_1	K_2	K_3	Γ
FEM	HMX	1.89	1.003	10.74	120	550	1.59	4.95	5.47	1.1

脉冲冲击波由下上传播,由于阻抗的原因,首先到达晶体表面的冲击波发生反射和透射,反射的冲击波使粘结剂剪切粘性作功与摩擦作功,导致这些区域温度首先升高,如图 4(a)所示,非均质炸药中传播的冲击波通过不规则多边形后,并不是简单的间断,而是形成了一个复杂的波系。

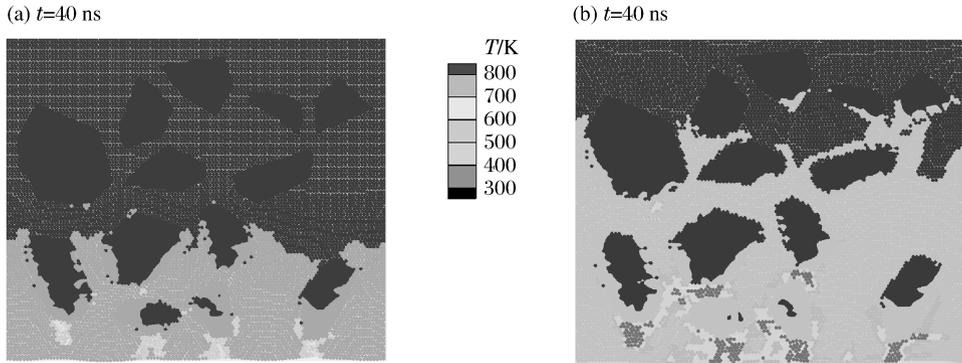


图 4 不同时刻的温度分布

Fig. 4 Temperature contours at different times

随着冲击波的回反射,晶体与粘结剂间的相互作用使该区域温度不断升高,高温区多集中在晶体间的变形较大的粘结剂部分,如图 4(b)所示。数值模拟结果可见,沿冲击波传播的方向,HMX 与粘结剂接触处温度分布较集中,热点区域多集中在多边形之间的区域,多边形晶体间冲击波的相互作用是热点生成的重要原因之一。这与 P. A. Conley 等^[2]所得的计算结论基本一致。

HMX 晶体温度明显低于粘结剂,且晶体边界温升高于内部,如图 5 所示。数值模拟结果发现,由于粘结剂间的温升主要由粘性摩擦和塑性剪切耗散功引起,晶体的温升由内能的增加引起,从而导致粘结剂的温升与冲击波阵面存在一定滞后现象,而炸药晶体的温升具有较好的同步性。

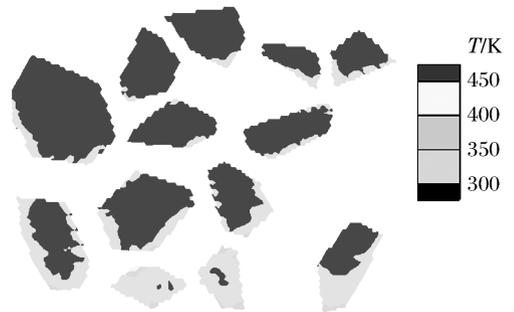


图 5 70 ns 时 HMX 晶体的温度分布

Fig. 5 Temperature contours of HMX at 70 ns

6 结 论

(1) 采用结合方法开展热点生成的细观模拟是可行的,它不仅能得到热点温升的变化趋势,而且可以初步模拟热点生成的细观过程,特别是模拟晶体与粘结剂间相互作用的细观演化过程,使模拟受冲击荷载下非均匀混合材料的细观响应成为可能。

(2) 细观模拟表明冲击作用下的塑料粘结炸药的热点多集中在晶体间变形较大的粘结剂部分,冲击波在粘结剂与晶体间的相互作用引起的剪切粘性做功与摩擦做功是热点生成的重要原因之一;HMX 晶体温度明显低于粘结剂,且晶体边界温度高于内部。

本文工作仅是对塑料粘结炸药热点生成的初步模拟,今后将不断完善计算程序,综合考虑如微孔洞粘塑性塌缩等多种热点生成机制。

参考文献:

- [1] Campell A W, Davis W G, Travis J R. Shock initiation of detonation in liquid explosives[J]. Physics of Fluids, 1961,4(4):498.

- [2] Conley P A, Benson D J. Microstructural effects in shock initiation[C]//Proceedings of the 11th International Symposium on Detonation. Colorado, Snowmass, 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. 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] 王歇成, 邵敏. 有限单元法基本原理和数值方法[M]. 北京: 清华大学出版社, 1996.
- [7] 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.
- [8] 王文强. 离散元方法及其在材料和结构力学响应分析中的应用[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2000.
- [9] 傅华, 刘仓理, 王文强, 等. 冲击动力学中离散元与有限元相结合的计算方法研究[J]. 高压物理学报, 2006, 20(4): 379-385.
- FU Hua, LIU Cang-li, WANG Wen-qiang, et al. A combined discrete/finite element method in shock dynamics [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2006, 20(4): 379-385.

Preliminary simulation of hot spot formation for plastic bonded explosives at mesoscale

FU Hua^{*}, LIU Cang-li, WANG Wen-qiang, Tan Duo-wang, LI Tao
(*Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics,
China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, Sichuan, China*)

Abstract: The preliminary mesoscale simulation was done for the hot spot formation of plastic bonded explosives (PBX) under shock loading with the combined method of the finite element and discrete element methods. The explosive crystals and binder are simulated using FEM and DEM, respectively. Simulated results indicate that hot spots focus on the binder region between crystals. The important factor of hot spot formation is the shock interaction between crystals and binder, the temperature of HMX is lower than that of binder, and the periphery temperature is higher than the inner temperature in HMX crystals.

Key words: fluid mechanics; hot spot; mesoscale simulation; PBX; finite element method; discrete element method

* Corresponding author: FU Hua
E-mail address: fmyfuhua@163.com
Telephone: 86-816-2485110