

DOI: 10.11883/bzycj-2017-0254

高温下带金属壳 PBX 炸药低速撞击 敏感性数值模拟*

胡 偲, 吴艳青, 黄风雷

(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: 炸药撞击感度和热安全性是评价炸药安全性能的重要指标。为了对高温下炸药撞击敏感性变化规律进行可靠预测, 本文中通过数值模拟, 研究不同预加热温度下带壳 PBX 炸药装药在小弹丸低速撞击下的热力学响应, 得到炸药点火前至点火阶段局部高温区的位置、形态、温度和应变随时间在炸药中分布的变化。结果显示, 炸药发生点火的撞击阈值速度与烤燃温度的关系并非单一随温度升高而降低, 而是在加热至 348.15 K 时达到最高; 根据温度和应力应变云图分析可得, 随着烤燃温度的提高, 炸药强度下降, PBX 炸药装药局部高温区快速升温的主导因素由局部剪切变为压缩。热软化对炸药的撞击敏感性起重要作用。

关键词: PBX 炸药; 热力耦合; 撞击; 敏感性

中图分类号: O383 **国标学科代码:** 13035 **文献标志码:** A

在炸药的存储、运输和装配过程中, 常常出现炸药暴露或曾经暴露在高温条件下的部分被约束在容器中时受到低速撞击的复合场景, 可能导致炸药被意外点燃, 进而转化成为更剧烈的爆燃或爆轰, 引发多种事故^[1-3]。长久以来, 炸药的撞击安全性和热安全性一般是分开研究。Steven 撞击实验被广泛用于研究炸药的撞击敏感性^[4], 确定带金属壳约束的炸药受钢制子弹低速撞击点火的临界速度^[5]。张文英等^[6]对不同厚度的高能炸药进行改良的 Steven 实验, 并提出力学因素导致的反应可能存在通用的机理。Shukla 等^[7]研究了不同形状的子弹撞击炸药装药导致装药压碎、穿刺和贯穿情况, 并提出了对应上述情况的几种点火机制, 其中包括摩擦、剪切和应变。在炸药的热安全性方面, 前人设计了多种烤燃试验用以观察炸药装药的响应并预测炸药在高温下的行为^[8-9], 为炸药热点火的研究提供有用信息^[10]。Steven 实验和烤燃试验都可为建立数值模拟的初始数据库提供便利^[7]。目前这两方面的研究已经阐明, 炸药的内部结构可能在撞击或高温作用下发生变化^[11], 热损伤和力学损伤在微观和宏观尺度下同时存在, 因此在实际情景即热力复合的条件下, 需要考虑热力耦合效应。

PBX 高能炸药在军事方面的应用使得其特性广受关注, 它的主要成分为炸药晶体和粘合剂。炸药晶体的相变^[12]、吸热或放热粘结剂的影响^[13]以及这两种成分之间的巨大差异使得 PBX 炸药的损伤机制非常复杂, 而实验研究中也体现出了热损伤与撞击敏感性之间关系的复杂性。Dickson 等^[8]提出, 热点火期间 PBX 的热学性能与力学性能相互紧密耦合。Forbes 等^[14]测试了 LX-04-01 和 LX-17 的安全性行为, 在 170 及 250℃ 的高温下对两种炸药进行撞击试验, 结果显示加热处理后的两种炸药的安全性均有下降倾向。Sandusky 等^[15]研究了 PBX-9502 不同温度下的撞击安全性, 并与未加热的情景相互对照, 结果显示, 加热至 240℃ 炸药的点火阈值速度略微降低。上述试验和计算结果均表明: 加热后炸药的冲击起爆距离和发生点火临界速度降低, 即高温下炸药的感度提高。Dai 等^[16]研究了加热

* 收稿日期: 2017-07-10; 修回日期: 2017-12-21

基金项目: 科学挑战专题(TZ2016001); 国家自然科学基金(11572045,11472051);
中物院安全弹药研发中心开放基金(RMC2015B03)

第一作者: 胡 偲(1994—), 女, 博士, 3120160068@bit.edu.cn;

通信作者: 吴艳青(1974—), 女, 博士, 教授, wuyqing@bit.edu.cn。

至 75、105 和 160 °C 的 PBX-2 炸药 (HMX/TATB/olefin) 的撞击敏感性, 并使用扫描电镜 (SEM) 检验加热后炸药的热损伤情况。分析发现, 在某些特定加热温度下的炸药撞击安全性将得到改善, 而不是单一性地降低。

与实验研究相比, PBX 炸药热力耦合加载数值模拟研究, 尤其是在数值预测与实验结果比较方面直到现在都非常欠缺。烤燃温度对 PBX 敏感性的影响还有待进一步深入的研究。根据文献中的数据, PBX 的模量随着烤燃温度的升高明显下降, 这表明烤燃温度可能会影响受撞击的 PBX 的变形过程, 并进一步影响撞击点火的临界速度。为研究温度对 PBX 炸药撞击敏感性的作用, 本文中建立有限元模型模拟 HMX 基 PBX 炸药在不同预加热温度下受子弹低速撞击时的热力学性能变化, 分析温度对炸药本构参数的影响。

1 有限元模型

1.1 炸药未反应时的温度相关本构模型

Dai 等^[16] 的实验中, PBX 炸药材料的主要成分为 HMX、TATB 和粘结剂。模型偏应力张量由一个弹塑性模型描述, 偏应力-应变关系描述如下:

$$S_{ij} = 2G(e_{ij} - e_{ij}^p) \quad (1)$$

式中: S_{ij} 为偏应力, e_{ij} 为偏应变, e_{ij}^p 为偏应变中的塑性部分, 上标 p 代表塑性, 下标 $i, j = 1, 2, 3$; G 为材料的剪切模量。若一点的 von-Mises 应力 $\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{3}{2}S_{ij}S_{ij}}$ 大于压缩强度 σ_y , 则认为该点进入塑性状态。偏应力 S_{ij} 通过满足 von-Mises 准则抗压强度 $\sigma_y = \bar{\sigma}$ 确定。

随着温度的升高, PBX 的抗拉强度下降。当加热到 348.15 K 以上时, PBX 的拉伸强度低于 0.5 MPa, 而当温度超过 80 °C 时, 拉伸强度接近零^[17]。此时, 随着粘合剂黏度的降低主导 PBX 炸药的力学响应^[18-19], PBX 强度达最低, 表现出黏性流动的性质^[16]。考虑温度和应变率效应的影响, 选择含有应变率项和温度项的 Johnson-Cook 强度模型^[20], 抗压强度模型表示为:

$$\sigma_y = (A + B\varepsilon_p^n)(1 + C \ln \varepsilon^*)(1 - T^{*m}) \quad (2)$$

其中, ε_p 为等效塑性应变, $\varepsilon^* = \dot{\varepsilon}/\dot{\varepsilon}_0$ 为 $\dot{\varepsilon}_0 = 1.0 \text{ s}^{-1}$ 时的无量纲应变率, $T^* = (T - T_{ref}) / (T_m - T_{ref})$ 为相对温度, T_{ref} 为环境温度, T_m 代表材料熔化温度, 该模型仅在 $0 \leq T^* \leq 1.0$ 时成立。A、B、C、m、n 为材料参数, A 为材料屈服极限, B 为加工硬化模量, C 为应变率常数, n 为硬化系数, m 为热软化常数。

硬化系数 n 参考与 PBX 粘结剂成分力学性能相似的高聚物取 1, 环境温度取为室温 301.15 K, 材料熔化温度可通过 PBX-2 的热失重分析曲线 (TG 曲线) 得到^[16]; 其余参数由一系列压缩实验得到^[21]。Johnson-Cook 强度模型中所使用的材料参数总结至表 1, 图 1 为使用这些参数时的应变率-温度-最大流动应力曲面图。

对 PBX 进行热处理可能使其孔隙率发生明显变化^[22-23], 因此, 选择孔隙率相关的压力-体积关系描述加热后固体炸药的压缩行为。固体 PBX 炸药的压力为:

表 1 Johnson-Cook 强度模型参数

Table 1 Parameters of Johnson-Cook model

A/MPa	B/MPa	C	m	n	T_{ref}/K	T_m/K
15	0	0.2	0.6	1	301.15	540

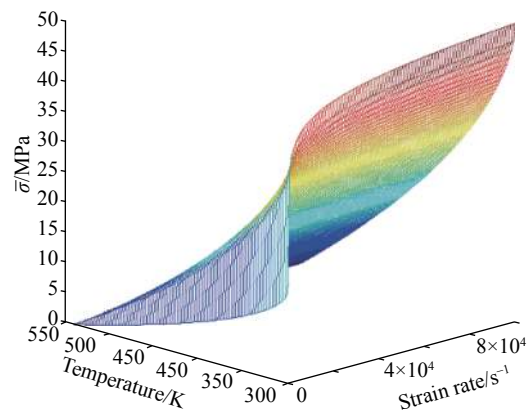


图 1 使用表 1 参数的应变率-温度-最大流动应力曲面图
Fig. 1 Maximum flow stress as a function of temperature and strain rate at selected parameters

$$\begin{cases} p_s = \left(\frac{p_{crush}}{\mu_{crush}}\right)\mu & \mu \leq \mu_{crush} \\ p_s = p_{crush} + K_1\bar{\mu} + K_2\bar{\mu}^2 + K_3\bar{\mu}^3 & \mu_{crush} < \mu \leq \mu_{lock} \\ p_s = K_{lock}(\mu - \mu_{lock}) & \mu > \mu_{lock} \end{cases} \quad (3)$$

式中: $\mu = \rho/\rho_0 - 1$, $\bar{\mu} = \mu - \mu_{crush}$, K_1 、 K_2 、 K_3 、 p_{crush} 、 μ_{crush} 、 K_{lock} 、 μ_{lock} 为材料参数, 下标 s 表示固体。参数值取自参考文献 [24]。压力模型参数列于表 2。该方程即固体反应物的状态方程。

表 2 固体反应物的状态方程参数

Table 2 Equation of the state parameters for solid reactants

p_{crush}/MPa	μ_{crush}	K_1	K_2	K_3	K_{lock}	μ_{lock}
0.689 5	0.125×10^{-3}	$0.102 7 \times 10^{11}$	$0.217 2 \times 10^{12}$	$0.288 8 \times 10^{13}$	$0.665 4 \times 10^{11}$	0.09

1.2 产物的状态方程

反应流模型的建立需要 2 个状态方程和一个反应速率定律^[18], 使用 Jones–Wilkins–Lee 状态方程来描述反应产物的压力、体积和温度之间的关系。反应气体产物的压力表示为:

$$p_g = R_1 \left(1 - \frac{\omega}{R_2 \bar{V}}\right) \exp(-R_2 \bar{V}) + R_3 \left(1 - \frac{\omega}{R_4 \bar{V}}\right) \exp(-R_4 \bar{V}) + \frac{\omega E}{\bar{V}} \quad (4)$$

式中: $\bar{V} = V_g/V_0$ 为相对体积, V_g 为气体体积, 下标 g 表示气体, V_0 为初始体积, E 为初始体积内能, R_1 、 R_2 、 R_3 和 R_4 为材料参数, ω 是 Grüneisen 常数, 根据参考文献 [19] 选择参数值, 所使用的 JWL 的 EOS 参数列于表 3。

表 3 气体产物的状态方程参数

Table 3 Equation of the state parameters for gaseous products

R_1/GPa	R_2	R_3/GPa	R_4	ω
166.89	5.9	5.969	2.1	0.45

1.3 反应速率

对于化学反应动力学, 考虑到在反应的早期阶段主要是低程度热分解, 只有较少部分的炸药被消耗。使用温度相关的三步 Arrhenius 模型来描述该时期的化学反应动力学:

$$r_k = Z_k \exp\left(-\frac{E_{ak}}{RT_a}\right)(1 - F_k), \quad k = 1, 2, 3 \quad (5)$$

式中: r_k 为反应速率, Z_k 为频率因子, E_{ak} 为反应 k 的活化能; R 为理想气体常数, T_a 为绝对温度, F 为反应过程分数, $F = 0$ 表示炸药尚未反应, $F = 1.0$ 表示炸药反应完全。参考值的选择主要根据参考文献 [25], 根据 Dai 等^[16] 的实验进行了调整以提高结果的一致性, 取值如表 4 所示。

表 4 PBX 化学动力学参数

Table 4 Chemical kinetic parameters for PBX

No.	Z_k/s^{-1}	$E_{ak}/(\text{kJ} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{mol} \cdot \text{K})$
1	1.08×10^{26}	148.93
2	1.41×10^{21}	220.64
3	2.60×10^{16}	185.48

1.4 温度计算

由于化学反应发展过程受到局部反应影响^[26], 局部温度对于形成点火核心起到重要作用。固体反应物的温度计算根据下式:

$$T_s = T_0 + \frac{\Delta E}{C_{V,s}\rho} \quad (6)$$

式中: T_0 为初始温度, ΔE 为单位初始体积的内能增量, $C_{V,s}$ 为固体的比热容, ρ 为密度。

气体产物的温度可以使用文献 [27] 中给出的方程计算:

$$T_g = \left(\frac{u_{Cl}}{u_g}\right)^\omega \left[T_{Cl} + \frac{1}{C_{V,Cl}} \left(\frac{u_g}{u_{Cl}}\right)^\omega (e_g - e_i(u_g)) \right] \quad (7)$$

$$e(u_g) = \frac{u_0}{R_3} R_1 \exp\left(-R_3 \frac{u_g}{u_0}\right) + \frac{u_0}{R_4} R_2 \exp\left(-R_4 \frac{u_g}{u_0}\right) + \frac{R_5 u_0}{\omega} \left(\frac{u_0}{u_g}\right)^\omega \quad (8)$$

式中: $C_{v,CJ}$ 为 CJ 状态下的比热容, v_{CJ} 为 CJ 状态下的比容, T_{CJ} 为 CJ 状态的气体产物的温度。参数选取文献 [24] 的计算结果, 列于表 5。

1.5 混合法则

在使用的反应模型中所采用的混合法则假设未反应炸药和气体反应产物的压力和温度同时达平衡^[27], 即:

$$p_s(v_s, e_s) = p_g(v_g, e_g) \quad (9)$$

$$T_s(v_s, e_s) = T_g(v_g, e_g) \quad (10)$$

混合物的比内能和比体积为:

$$e = e_s(1 - \lambda) + e_g\lambda \quad (11)$$

$$v = v_s(1 - \lambda) + v_g\lambda \quad (12)$$

式中: e, v 分别为混合物的比内能和比体积, 下标 s, g 分别对应表示固体和气体。对 v_s 和 e_s 使用 Newton-Raphson 迭代法来解式(9)、(10)中的平衡。

1.6 数值模型

图 2 为本文中使用的二维轴对称模型。炸药尺寸为 $\varnothing 50 \text{ mm} \times 20 \text{ mm}$, 钢盖板厚度为 3.5 mm, 约束炸药的钢环厚度为 5 mm, 这两部分与钢制炸药基底合并成为包覆炸药的外壳, 小弹丸尺寸为 $\varnothing 20 \text{ mm} \times 20 \text{ mm}$ 。计算采用四边形网格, 模型节点总数为 1 549, 单元总数为 1 370, 底部加约束。顶端小弹丸以不同初始速度撞击炸药装药, 撞击前炸药的初始温度均一, 作为预加热温度。由于点火发生在几乎不到 $1 \mu\text{s}$ 的时间尺度上, 热传导只会影响相当小的距离, 因此可忽略热传导作用^[28, 29], 模型绝热。60 μs 内炸药将完成加载和卸载, 因此模拟时长设置为 60 μs 。炸药钢制外壳和小弹丸的材料参数根据对低碳钢进行静态拉伸实验确定。

表 5 用于温度计算的参数

Table 5 Parameters for temperature calculation

T_{CJ}/K	$v_{CJ}/\text{cm}^3/\text{g}$	R_s/GPa	$C_{r,s}/(\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$C_{r,CJ}/(\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$
2 500	0.387 3	0.85	1 600	2 000

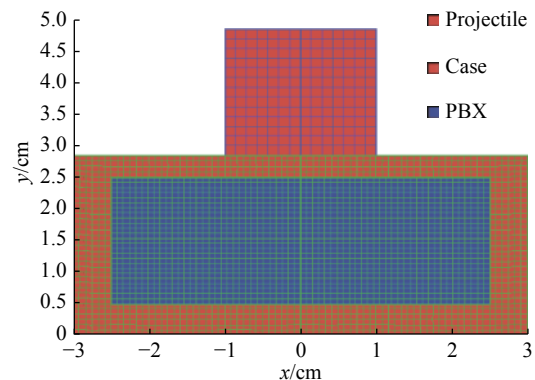


图 2 二维轴对称有限元模型及其网格划分示意图

Fig. 2 Meshing of two-dimensional axisymmetric finite-element model

2 结果分析

2.1 确定临界撞击速度

使用二维数值计算对 HMX 基 PBX 炸药的烤燃后撞击的热力复合试验^[16]进行模拟, 通过与实验结果对比, 可将模拟结果中炸药的反应过程分数与实验的反应程度对应起来, 判断是否发生点火, 并讨论不同预加热温度对炸药反应程度的影响。

图 3 为常温下 (301.15 K) 时不同撞击速度下炸药装药在 60 μs 时的反应过程分数云图。撞击速度为 235 m/s 时, 60 μs 时炸药装药中最大反应过程分数低于 0.8, 对比文献 [16] 中撞击速度为 237 m/s 时的实验结果, 可以看出约 235 m/s 的撞击速度下炸药未发生点火。而当撞击速度提高到 265 m/s, 最大反应过程分数由 0.7 左右提高到 0.9, 与实验^[16]中撞击速度 269.9 m/s 时 PBX 炸药装药发生点火且反应消耗了所有炸药相对应。同时可以注意到, 该温度下反应过程分数最高的区域为子弹撞击边缘, 该区域为可能的点火起始的位置。

预加热温度为 348.15 K 时, 模拟结果显示在 290 m/s 的撞击速度下, 60 μs 时炸药中最大反应过程分数不超过 0.7, 大部分区域的反应过程分数低于 0.5 (图 4); 当撞击速度为 360 m/s 时, 最大反应过程分数

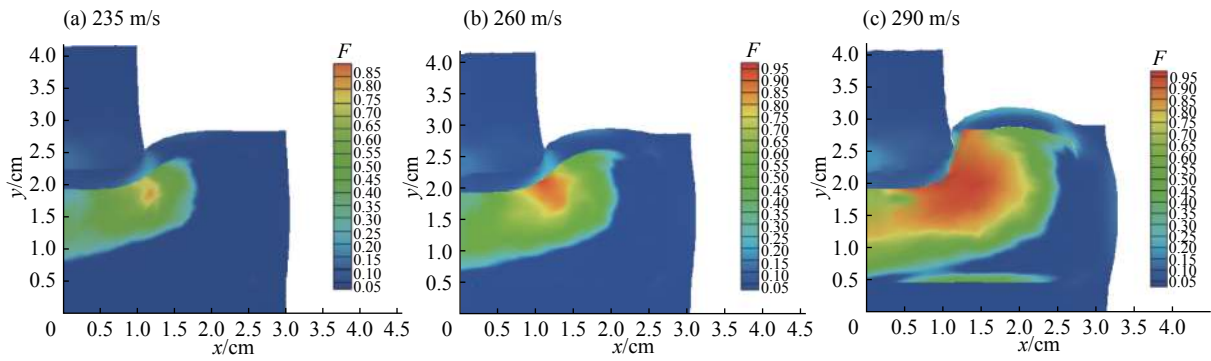


图 3 预加热温度为 301.15 K 时, 不同撞击速度下炸药装药的反应过程分数云图

Fig. 3 Reaction fractions at different impact velocities and a preheating temperature of 301.15 K

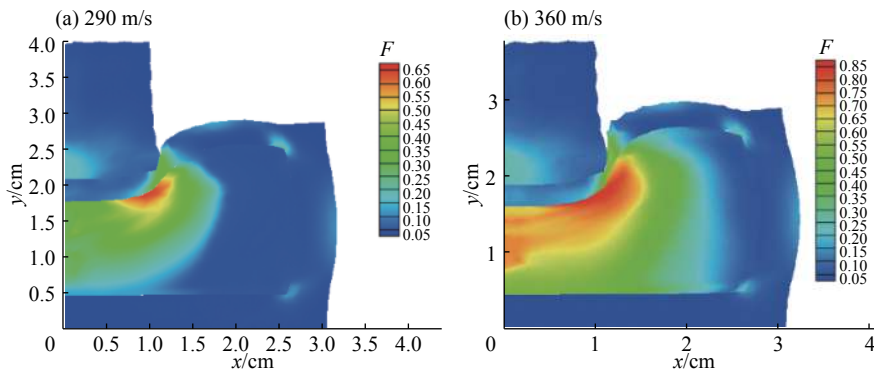


图 4 预加热温度为 348.15 K 时, 不同撞击速度下炸药装药的反应过程分数云图

Fig. 4 Reaction fractions at different impact velocities and a preheating temperature of 348.15 K

超过 0.9, 大部分区域的反应过程分数都大于 0.5。对应的实验结果^[16]显示, 撞击速度为 276 m/s 和 294 m/s 时, 炸药上表面出现压痕, 但未发生明显反应, 而撞击速度为 367 m/s 时发生点火, 所有炸药都被反应消耗。

预加热温度为 378.15 K 时, 模拟结果显示炸药在撞击速度为 285 m/s 时最高反应过程分数小于 0.8, 在撞击速度为 295 m/s 时最高反应过程分数大于 0.9, 如图 5 所示。根据实验^[16], PBX 炸药在撞击速度小于 286 m/s 时被压缩, 但未被消耗, 说明未发生点火, 而在撞击速度为 298.3 m/s 和 315.4 m/s 时发生燃烧反应。不同于常温时, 该温度下反应过程分数最高区域位于炸药和子弹的中轴线, 靠近炸药的上表面。关于可能的点火起始位置变化将在后文中作进一步讨论。

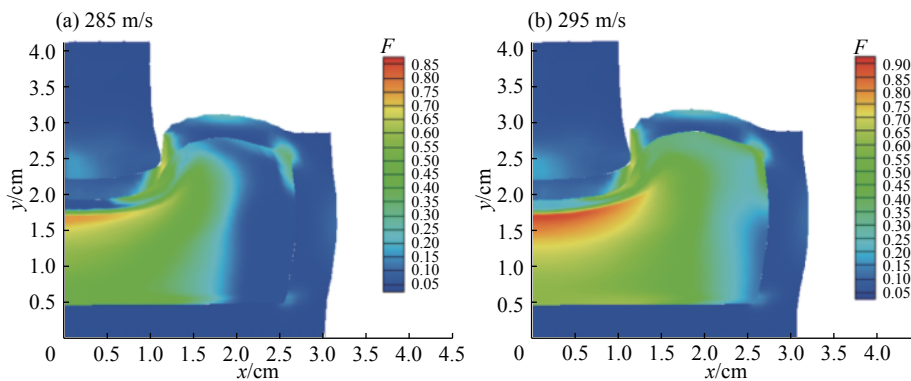


图 5 预加热温度为 378.15 K 时, 不同撞击速度下炸药装药的反应过程分数云图

Fig. 5 Reaction fractions at different impact velocities and a preheating temperature of 378.15 K

根据上述对比可见,当炸药装药所有单元反应过程分数的最大值在 60 μs 内达到 0.9 时,局部反应可能发生失控,发展成为更高级别反应,发生点火。由此通过反应过程分数的最大值可以确定临界撞击点火速度。常温(301.15 K)时,临界撞击点火速度在 260~265 m/s 之间(图 6(a));预加热温度为 348.15 K 时,临界撞击点火速度在 330~360 m/s 之间(图 6(b));预加热温度为 378.15 K 时,临界撞击点火速度在 285~355 m/s 之间(图 6(c))。模拟结果显示临界撞击点火速度不随预加热温度单调降低,而是先升高至 360 m/s,此时预加热温度为 348.15 K,再随温度升高而降低。也即说明炸药装药在预加热温度约为 348.15 K 时撞击感度最低。模拟结果与其对应的实验结果^[16]相符合。

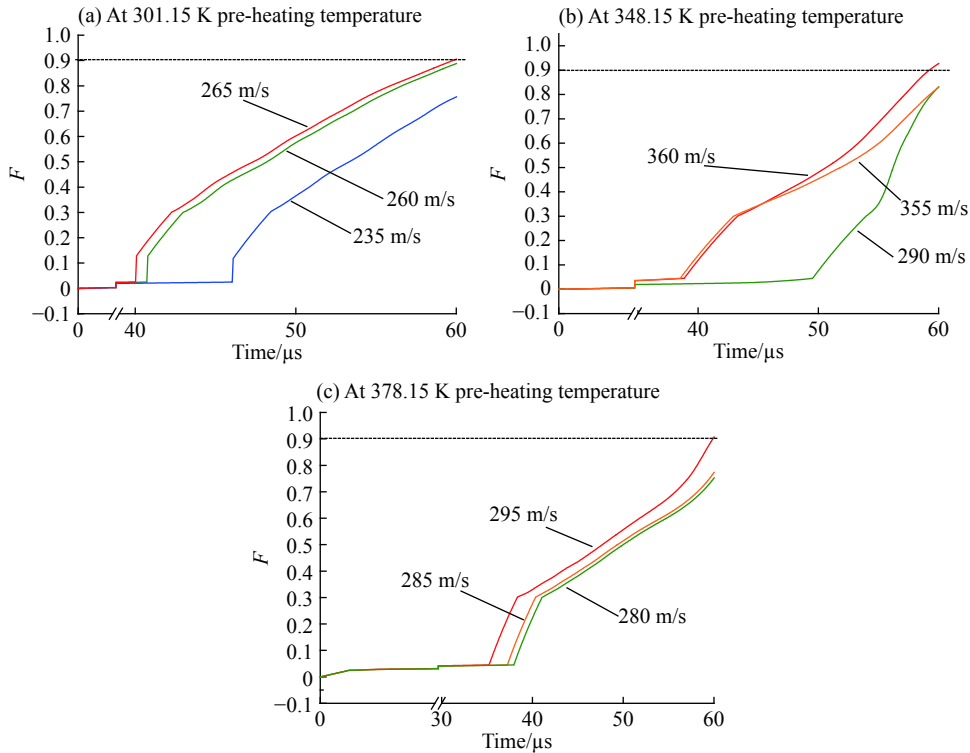


图 6 不同预加热温度和撞击速度下炸药装药中的最大反应过程分数

Fig. 6 The maximum reaction process fraction at different pre-heating temperatures and impact velocities

2.2 预加热温度与反应程度

为判断炸药反应的程度,计算不同预加热温度和撞击速度下 PBX 炸药装药的平均反应过程分数如图 7 所示。通过与实验结果进行对比可见,当平均反应过程分数到约 0.15 时,炸药装药的反应程度高。

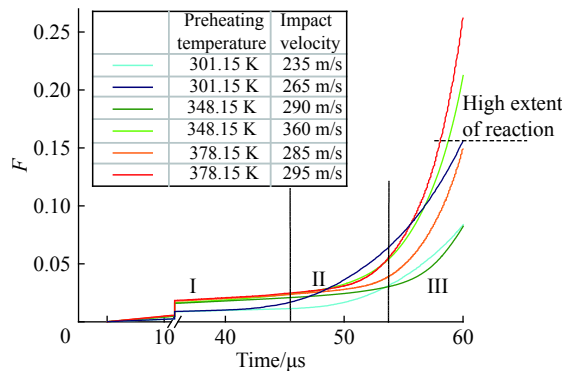


图 7 不同预加热温度和撞击速度下 PBX 炸药装药的平均反应过程分数

Fig. 7 The average reaction fractions of the PBX charge at different temperatures and impact velocities

炸药平均反应过程分数随预加热温度升高而加速上升的趋势说明, 在较高预加热温度下, PBX 炸药装药中的反应更易传播。可以将平均反应过程分数曲线分为 3 个阶段, 对应炸药到点火的反应过程中的 3 个阶段: (I) 缓慢的低速热分解; (II) 形成局部反应区域; (III) 局部反应区域内的化学反应放热, 加速这一区域的分解反应, 若反应程度升高足够快, 炸药装药将发生点火。

2.3 热软化对点火临界状态的影响

常温 (301.15 K) 下, 撞击速度为 265 m/s 时, 温度云图 (图 8) 显示在 55 μs 左右, 在子弹边缘下的炸药装药上表面出现了直径 20 mm 的环形局部高温区, 图中为二维轴对称模型的右半部分。同时根据图 9~11 可见, 这一区域体积应变和等效塑性应变最大, Mises 应力最小。可以推断, 撞击产生的剪切集中处的应力超过屈服强度, 导致局部升温。机械能使变形能转化为大量热能, 炸药材料受热点火, 产生局部燃烧反应。变形可能导致热软化, 材料越软, 变形越大, 生热越多。这一自馈过程可能形成很小的局部区域, 并产生极高的局部温度^[30-31]。总的反应过程释放能量, 并加速分解反应。若反应释放率足够大, 燃烧反应将失控成为爆轰^[32]。

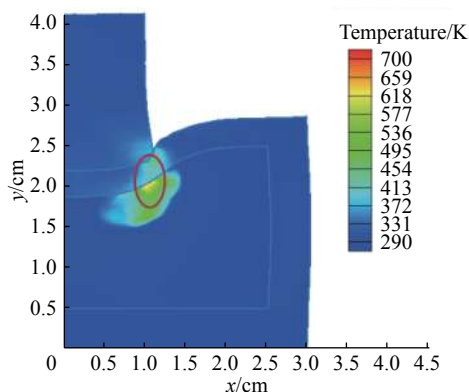


图 8 预加热温度为 301.15 K 时炸药装药的温度云图
Fig. 8 Temperature of the explosive charge at a preheating temperature of 301.15 K

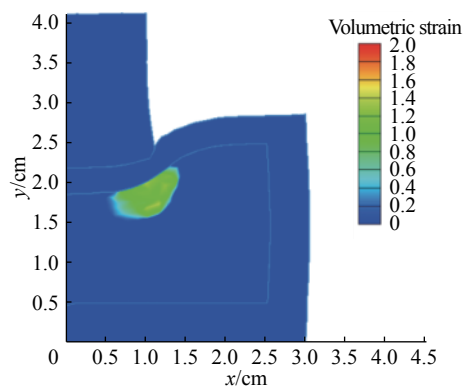


图 9 预加热温度为 301.15 K 时炸药装药的体积应变云图
Fig. 9 Volumetric strain of the explosive charge at a preheating temperature of 301.15 K

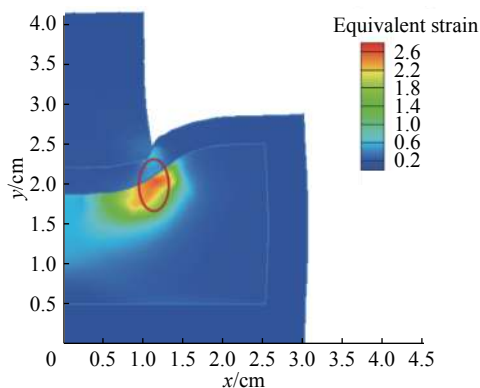


图 10 预加热温度为 301.15 K 炸药装药的等效应变云图
Fig. 10 Equivalent strain of the explosive charge at a preheating temperature of 301.15 K

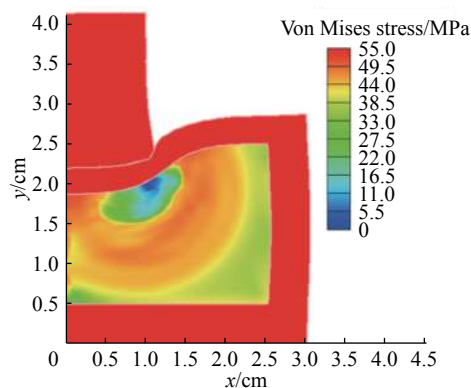


图 11 预加热温度为 301.15 K 炸药装药的 Mises 应力云图
Fig. 11 Mises stress of the explosive charge at a preheating temperature of 301.15 K

预加热温度为 348.15 K、撞击速度为 360 m/s 时, 约在 55 μs 时炸药装药中出现 2 个局部高温区。其一为在子弹边缘下的炸药装药上表面的环形局部高温区, 直径 19.30 mm; 另一个是出现在炸药中轴线上的点状局部高温区, 距离炸药上表面约 8.5 mm (图 12)。根据体积应变和等效塑性应变云图 (图 13~14) 分析可得, 环形局部高温区主要由塑性剪切效应导致, 而点状局部高温区由压缩功做功得到, 同时两高温区位置处的 Mises 应力最小 (图 15)。

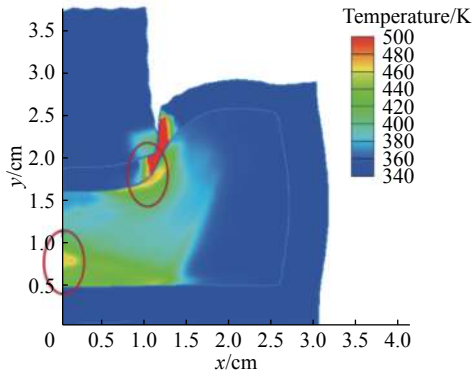


图 12 预加热温度为 348.15 K 时炸药装药的温度云图
Fig. 12 Temperature of the explosive charge at a preheating temperature of 348.15 K

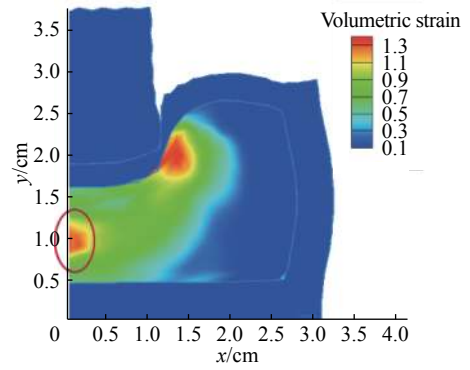


图 13 预加热温度为 348.15 K 时炸药装药的体积应变云图
Fig. 13 Volume strain of the explosive charge at a preheating temperature of 348.15 K

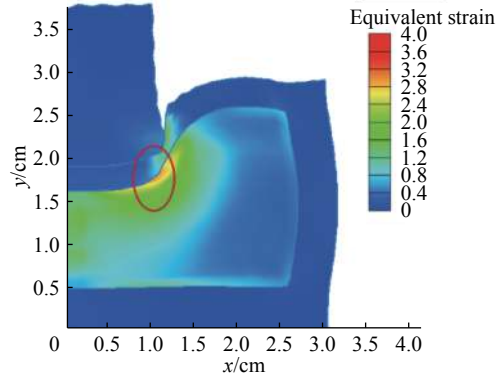


图 14 预加热温度为 348.15 K 炸药装药的等效应变云图
Fig. 14 Equivalent strain of the explosive charge at a preheating temperature of 348.15 K

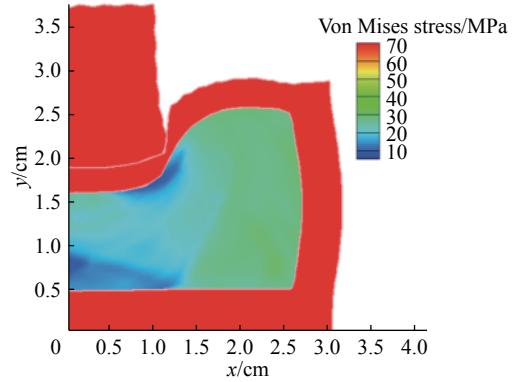


图 15 预加热温度为 348.15 K 炸药装药的 Mises 应力云图
Fig. 15 Mises stress of the explosive charge at a preheating temperature of 348.15 K

预加热温度 378.15 K, 撞击速度 295 m/s 时, 58 μ s 时, 盘状局部高温区出现在中轴线上, 距离炸药装药上表面约 3 mm(图 16)。如图 17~19 所示, Mises 应力较小的区域主要集中在炸药装药中部, 等效应变集中在子弹边缘下的炸药装药上表面, 而体积应变集中区域位于炸药装药中轴线上, 形状大小与温度云中局部高温区一致, 说明压缩而非剪切作用在此时对局部高温区的产生和升温起主要作用。

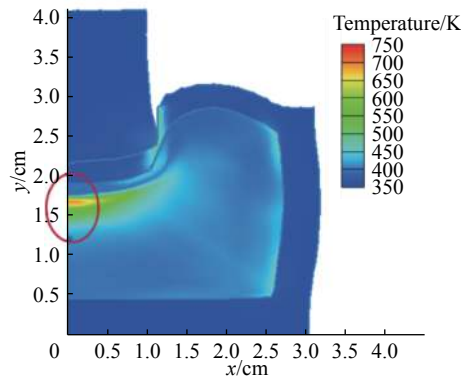


图 16 预加热温度为 378.15 K 时炸药装药的温度云图
Fig. 16 Temperature of the explosive charge at a preheating temperature of 378.15 K

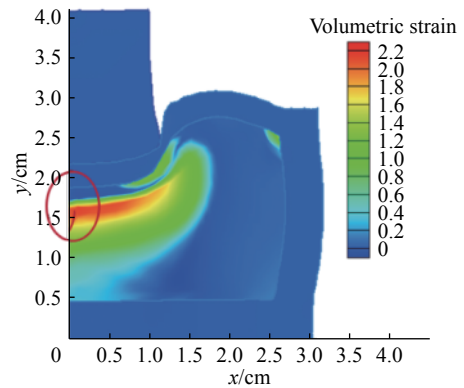


图 17 预加热温度为 378.15 K 时炸药装药的体积应变云图
Fig. 17 Volumetric strain of the explosive charge at a preheating temperature of 378.15 K

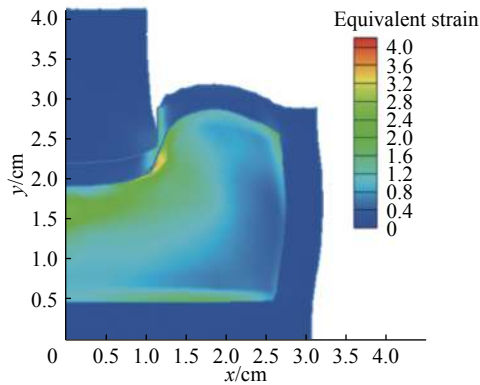


图 18 预加热温度为 378.15 K 炸药装药的等效应变云图
Fig. 18 Equivalent strain of the explosive charge at a preheating temperature of 378.15 K

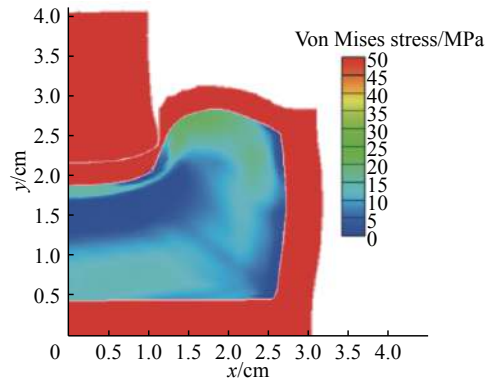


图 19 预加热温度为 378.15 K 炸药装药的 Mises 应力云图
Fig. 19 Mises stress of the explosive charge at a preheating temperature of 378.15 K

可以观察到, 局部高温区的位置随预加热温度升高, 由炸药表面剪切集中处(图 20(a))转向炸药中部受压缩最大处(图 20(b), (c))。图 21 为不同预加热温度下局部高温区的温度时间曲线。相比于常温, 高温下炸药温度突增趋于平缓, 这可能是由于炸药的热软化引起的。常温下发生点火的炸药局部高温区最先进入快速升温阶段, 而在预加热温度为 348.15 K 时, 其进入快速升温阶段的时间最晚, 同时其临界撞击点火速度阈值最高, 塑性功做功最大(图 22), 说明此时炸药撞击敏感性最低。根据图 23, 预加热温度越高, 同一时刻最高温度区内能越大, 点火发生的反应将更加剧烈。

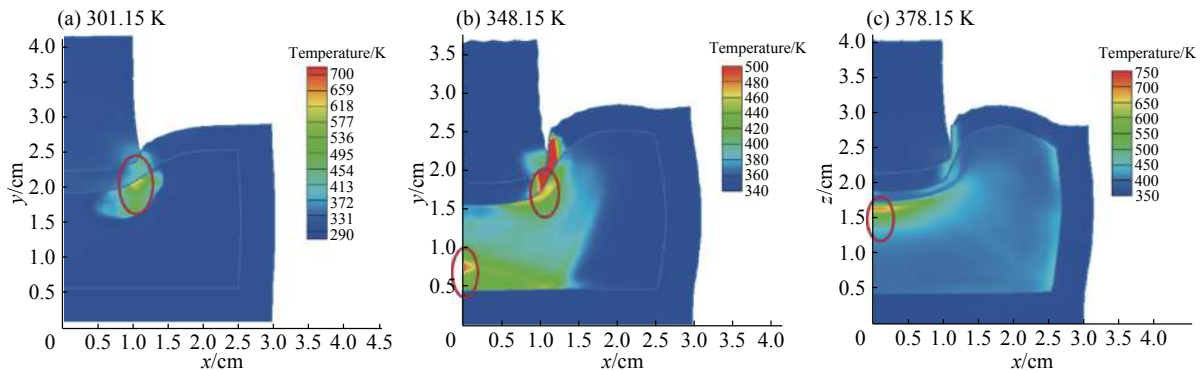


图 20 局部高温区的位置变化

Fig. 20 The change of the locations of localized heating at different preheating temperatures

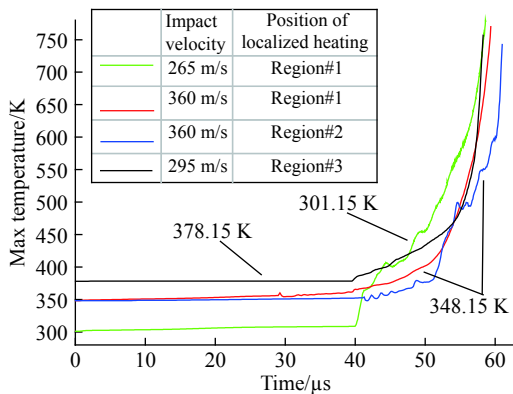


图 21 不同预加热温度下 PBX 炸药中局部高温区的温度时间曲线

Fig. 21 Temperature as a function of time for the localized heating regions at different preheating temperatures

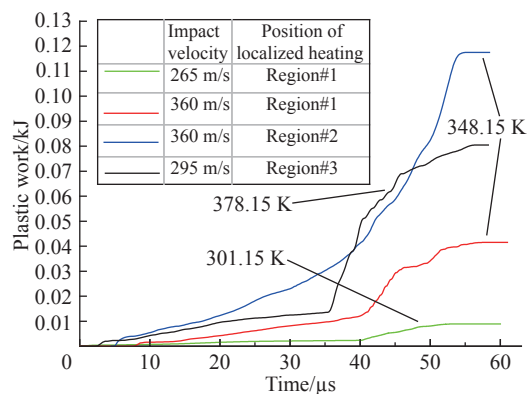


图 22 不同预加热温度下 PBX 炸药中局部高温区的塑性功时间曲线

Fig. 22 Plastic work as a function of time for the localized heating regions at different preheating temperatures

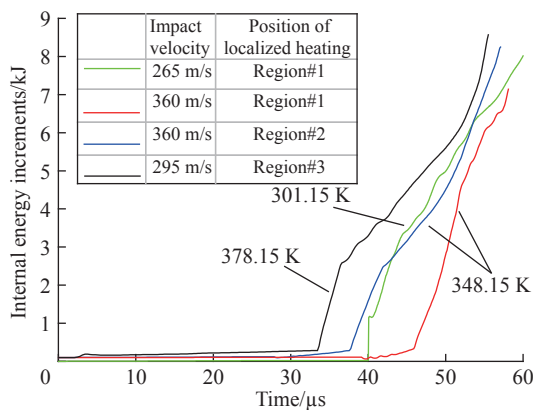


图 23 不同预加热温度下 PBX 炸药中局部高温区内能时程曲线

Fig. 23 Histories of internal energy for the localized heating regions at different preheating temperatures

3 结 论

通过对 HMX 基 PBX 炸药在不同烤燃温度下低速撞击实验的数值模拟,可以得到以下结论:炸药的发生点火的撞击阈值速度与烤燃温度的关系并非单一随温度升高而降低,而是随预加热温度先升高至预加热温度为 348.15 K 时达最大,此时阈值速度为 360 m/s,后在更高的预加热温度下下降,数值模拟复现了实验中的现象。随着预加热温度升高,局部高温区位置由炸药表面剪切集中处,转向炸药中部主要受压缩处。这样的现象可能由于受热炸药强度降低,压缩对局部高温区升温的作用超过剪切效应而产生。由此可见,热软化对炸药的撞击敏感性起重要作用。

参考文献:

- [1] KIM S, BARUA A, HORIE Y, et al. Prediction of probabilistic ignition behavior of PBXs from microstructural stochasticity[C]// Biennial International Conference of the APS Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter, 2013.
- [2] PERRY W L, ZUCKER J, DICKSON P M, et al. Interplay of explosive thermal reaction dynamics and structural confinement [J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, 101(7): 074901–5. DOI: 10.1063/1.2713090.
- [3] ASANTE D O, KIM S, CHAE J, et al. CFD cook-off simulation and thermal decomposition of confined high energetic material [J]. *Propellants Explosives Pyrotechnics*, 2015, 40(5): 699–705. DOI: 10.1002/prop.201400296.
- [4] CHIDESTER S K, GREEN L G, LEE C G. A frictional work predictive method for the initiation of solid high explosives from low-pressure impacts[R]. California, the United States: Lawrence Livermore National Laboratory, 1993.
- [5] BERGHOUT H L, SON S F, SKIDMORE C B, et al. Combustion of damaged PBX 9501 explosive [J]. *Thermochemica Acta*, 2002, 384(1-2): 261–77. DOI: 10.1016/S0040-6031(01)00802-4.
- [6] 张文英, 邓晓雅, 陈思瑾, 等. PBX9501 热感度、热膨胀及力学性能分子动力学模拟 [J]. *火炸药学报*, 2016, 39(3): 32–6. DOI: 10.14077/j.issn.1007-7812.2016.03.006.
ZHANG Wenying, DENG Xiaoya, CHEN Sijin, et al. Molecular dynamics simulation of thermal sensitivity, thermal expansion and mechanical properties of PBX9501 [J]. *Chinese Journal of Explosives and Propellants*, 2016, 39(3): 32–6. DOI: 10.14077/j.issn.1007-7812.2016.03.006.
- [7] SHUKLA P, DEEPU M. Experimental and numerical investigations of thermal ignition of a phase changing energetic material [J]. *Defence Science Journal*, 2016, 66(3): 228–35. DOI: 10.14429/dsj.66.9357.
- [8] DICKSON P, ASAY B, HENSON B, et al. Thermal cook-off response of confined PBX 9501[C]//Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2004.
- [9] BURNHAM K, WEESE R K, WEMHOFF A P, et al. A historical and current perspective on predicting thermal cookoff behavior [J]. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2007, 89(2): 407–15. DOI: 10.1007/s10973-006-8161-6.
- [10] GUSHANOV A R, VOLODINA N A, BELOV G V, et al. Numerical simulation of experiments on the low-velocity impact on HMX-based HE using explosive transformation initiation kinetics [J]. *Journal of Energetic Materials*, 2010, 28(S1): 50–65. DOI: 10.1080/07370651003720429.
- [11] DRODGE D R, WILLIAMSON D M. Understanding damage in polymer-bonded explosive composites [J]. *Journal of Materials Science*, 2016, 51(2): 668–79. DOI: 10.1007/s10853-013-7378-6.
- [12] WILLEY T M, LAUDERBACH L, GAGLIARDI F, et al. Mesoscale evolution of voids and microstructural changes in HMX-based explosives during heating through the beta-delta phase transition [J]. *Journal of Applied Physics*, 2015, 118(5): 055901. DOI: 10.1063/1.4927614.

- [13] YAN Q L, ZEMAN S, SANCHEZ-JIMENEZ P E, et al. The effect of polymer matrices on the thermal hazard properties of RDX-based PBXs by using model-free and combined kinetic analysis [J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2014, 271(1): 85–95. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2014.02:019.
- [14] FORBES J, TARVER C, URTIEW P, et al. The effects of confinement and temperature on the shock sensitivity of solid explosives[C]//The 11th International Detonation Symposium. Snowmass, Colorado, 1998.
- [15] SANDUSKY H W, ANDREWS S A, ALEXANDER K E. Hazard tests on a heated TATB-based high explosive[C]//The 11th International Detonation Symposium. Snowmass, Colorado, 1998.
- [16] DAI X G, WEN Y S, HUANG H, et al. Impact response characteristics of a cyclotetramethylene tetranitramine based polymer-bonded explosives under different temperatures [J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 114(11): 114906. DOI: 10.1063/1.4820248.
- [17] GRUAU C, PICART D, BELMAS R, et al. Ignition of a confined high explosive under low velocity impact [J]. *International Journal of Impact Engineering*, 2009, 36(4): 537–50. DOI: 10.1016/j.ijimpeng.2008.08.002.
- [18] APPAN A S, RENLUND A M, STACHOWIAK J C, et al. Mechanical properties determination by real-time ultrasonic characterization of thermally damaged energetic materials[C]//The 12th International Detonation Symposium. 2002.
- [19] DAVANDE H, BEDROV D, SMITH G D. Thermodynamic, transport, and viscoelastic properties of PBX-9501 binder: a molecular dynamics simulations study[J]. *Journal of Energetic Materials*, 2008, 26(2): 115–38. DOI: 10.1080/07370650701801937.
- [20] HOLMQUIST T J, JOHNSON G R. Determination of constants and comparison of results for various constitutive models [J]. *Journal De Physique Iii*, 1991, 1(C3): 853–60. DOI: 10.1051/Jp4:19913119.
- [21] GRAY III G, IDAR D, BLUMENTHAL W, et al. High-and low-strain rate compression properties of several energetic material composites as a function of strain rate and temperature: LA-UR-98-3059[R]. Los Alamos National Laboratory, 1998.
- [22] PARKER G R, PETERSON P D, ASAY B W, et al. Examination of morphological changes that affect gas permeation through thermally damaged explosives [J]. *Propellants Explosives Pyrotechnics*, 2004, 29(5): 274–81. DOI: 10.1002/prop.200400057.
- [23] PETERSON P D, MANG J T, ASAY B W. Quantitative analysis of damage in an octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazonic-based composite explosive subjected to a linear thermal gradient [J]. *Journal of Applied Physics*, 2005, 97(9): 7. DOI: 10.1063/1.1879072.
- [24] WANG X J, WU Y Q, HUANG F L. Thermal-mechanical-chemical responses of polymer-bonded explosives using a mesoscopic reactive model under impact loading [J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2017, 321(2): 56–67. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2016.08.061.
- [25] YOH J J, MCCLELLAND M A, MAIENSCHIN J L, et al. Simulating thermal explosion of octahydro-tetranitro-tetrazine-based explosives: Model comparison with experiment [J]. *Journal of Applied Physics*, 2006, 100(7): 9. DOI: 10.1063/1.2357418.
- [26] TARVER C M, CHIDESTER S K. On the violence of high explosive reactions [J]. *Journal of Pressure Vessel Technology-Transactions of the ASME*, 2005, 127(1): 39–48. DOI: 10.1115/1.1845474.
- [27] HANDLEY C A. Numerical modelling of two HMX-based plastic-bonded explosives at the mesoscale[D]. University of St Andrews, 2011.
- [28] MENIKOFF R, SEWELL T D. Constituent properties of HMX needed for mesoscale simulations [J]. *Combustion Theory and Modelling*, 2002, 6(1): 103–25. DOI: 10.1088/1364-7830/6/1/306.
- [29] HORIE Y. Hot spots, high explosives ignition, and material microstructure[C]//Materials Science Forum, 2014.
- [30] DIENES J K, ZUO Q H, KERSHNER J D. Impact initiation of explosives and propellants via statistical crack mechanics [J]. *Journal of the Mechanics & Physics of Solids*, 2006, 54(6): 1237–75. DOI: 10.1016/j.jmps.2005.12.001.
- [31] MENIKOFF R. Detonation waves in PBX 9501 [J]. *Combustion Theory and Modelling*, 2006, 10(6): 1003–21. DOI: 10.1080/13647830600851754.
- [32] HENSON B, ASAY B W, DICKSON P M, et al. Measurement of explosion time as a function of impact pressure for PBX 9501 subject to weak planar shocks[R]. Office of Scientific & Technical Information Technical Reports, 1997.

Numerical simulation of confined PBX charge under low velocity impact at high temperature

HU Cai, WU Yanqing, HUANG Fenglei

(*State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China*)

Abstract: Accidental initiations of the explosive subjected to mechanical or thermal loads have caused numerous catastrophic tragedies. The impact sensitivity and thermal safety of explosive is of great importance for the applications. Previous work showed an evident decline on modulus with increasing cook-off temperature, which suggest that Cook-off temperature may affect the deformation process of the impacted PBX, and further affect the critical impact velocities for initiation. In this work, to investigate the mechanical and thermal response of confined PBX charge under low velocity impact of a small projectile during cook-off events, a finite-element model was established to provide reliable prediction of explosive safety performance at high temperature. A thermal-mechanical-combined experiments from literature enabled comparisons between simulated results and measured data for the critical impact velocities of initiation for a HMX-based PBX charge (HMX/TATB/olefin). The simulation results showed that when it was heated up to 348.15 K, the critical impact velocity of initiation for the explosives reached the maximum (360 m/s). With the increase of cook-off temperature, the localized heating regions change from the surface of explosive charge to the center. This phenomenon was caused by the effect of compression overshadows shearing on the initiation because of the strength decreases in the heated PBX, implying that thermal softening plays an important role in the impact sensitivity of the heated PBX charge.

Keywords: PBX; thermal-mechanical coupling; impact; sensitivity

(责任编辑 王易难)